

Problema363: Xustifica o enlace nestas moléculas utilizando orbitais 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

Primeiro necesitamos coñecer a xeometría desta molécula. Axudámonos da estrutura de Lewis e da TRPECV.

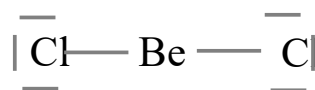
1º átomo central: Be

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

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

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

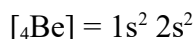
$$5^\circ \text{ PN} = \frac{\text{ED} - 2 \cdot \text{PE}}{2} = \frac{16 - 2 \cdot 2}{2} = 6 \text{ pares non enlazantes}$$



Segundo a TRPECV os dous pares electrónicos que están ao redor do Be deben dispoñerse nunha estrutura lineal, con ángulos de 180° , para que as repulsiones sexan mínimas.

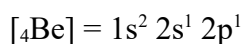
A estrutura lineal, con ángulos de 180° , é compatible cos híbridos sp, que tamén teñen esa xeometría.

Estrutura electrónica fundamental do Be:

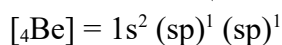
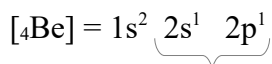


Para que os orbitais solapen e poidan dar lugar a enlaces deben ter un só electrón. Na estrutura electrónica fundamental do Be non temos electróns desapareados, por tanto non poderá dar lugar a enlaces.

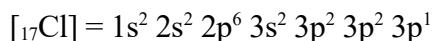
Para que poida formar enlaces o Be debe promocionar un electrón do orbital 2s ao orbital 2p, que ten un pouco máis de enerxía, pero esta diferenza de enerxía verase compensada con fartura coa formación de enlaces.



Para xustificar os ángulos de enlace de 180° , nunha estrutura lineal, debemos formar dous orbitais híbridos sp a partir de dous orbitais atómicos puros, 2s e 2p.

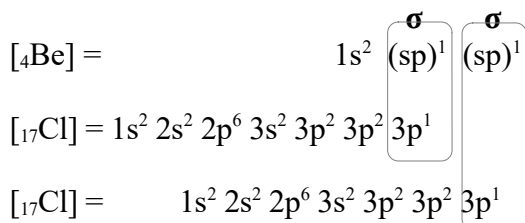


Os átomos de cloro teñen unha configuración:

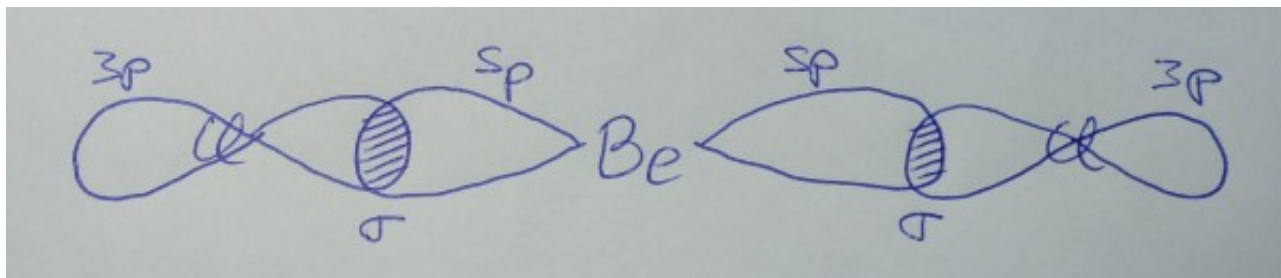


Por tanto o orbital 3p, que ten un electrón, é o que pode formar enlaces por solapamento de orbitais.

Esquema de solapamentos:



Esquema da molécula:



b) BCl_3

Primeiro necesitamos coñecer a xeometría desta molécula. Axudámonos da estrutura de Lewis e da TRPECV.

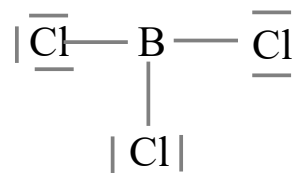
1º átomo central: B

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

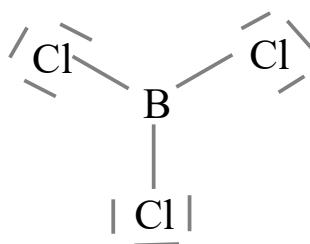
3º $ED = 3e^- \cdot 1(\text{B}) + 7e^- \cdot 3(\text{Cl}) = 24e^-$

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

5º $PN = \frac{ED - 2 \cdot PE}{2} = \frac{24 - 2 \cdot 3}{2} = 9 \text{ pares non enlazantes}$



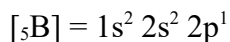
Segundo a TRPECV os tres pares electrónicos que están ao redor do B deben dispoñerse nunha estrutura trigonal plana, con ángulos de 120° , para que as repulsiones sexan mínimas.



A estrutura trigonal plana, con ángulos de 120° , é compatible cos híbridos sp^2 , que tamén teñen esa

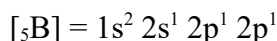
xeometría.

Estrutura electrónica fundamental do B:

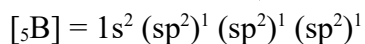
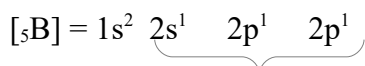


Para que os orbitais solapen e poidan dar lugar a enlaces deben ter un só electrón. Na estrutura electrónica fundamental do B só temos un orbital con electróns desapareados, por tanto só poderá dar lugar a un enlace.

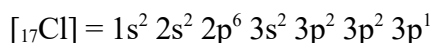
Para que poida formar tres enlaces o B debe promocionar un electrón do orbital 2s a un orbital 2p, que ten un pouco máis de enerxía, pero esta diferenza de enerxía verase compensada con fartura coa formación de enlaces.



Para xustificar os ángulos de ligazón de 120° , nunha estrutura trigonal plana, debemos formar tres orbitais híbridos sp^2 a partir de tres orbitais atómicos puros, un 2s e dous 2p.

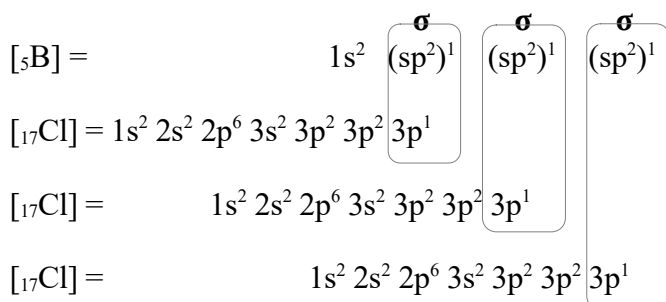


Os átomos de cloro teñen unha configuración:

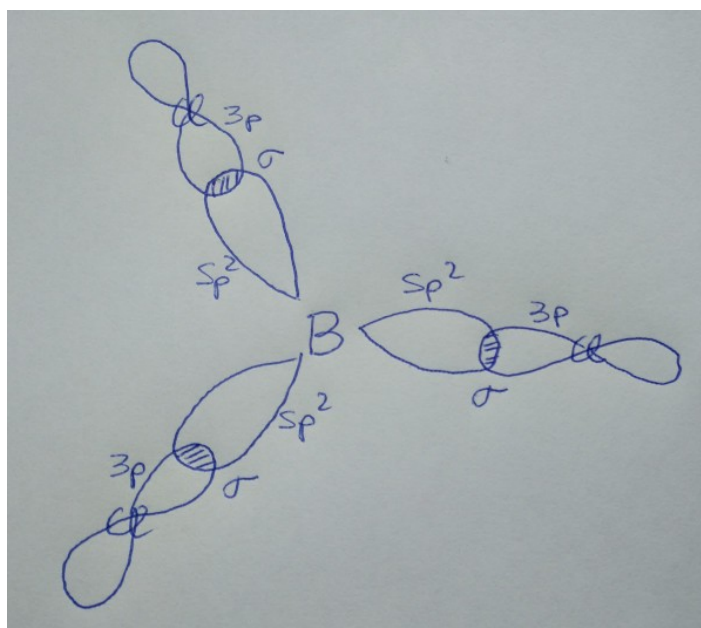


Por tanto o orbital 3p, que ten un electrón, é o que pode formar enlaces por solapamento de orbitais.

Esquema de solapamentos:



Esquema da molécula:



c) CH₄

Primeiro necesitamos coñecer a xeometría desta molécula. Axudámonos da estrutura de Lewis e da TRPECV.

CH₄

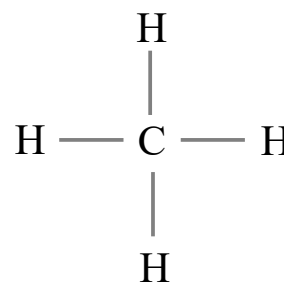
1º átomo central: C

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

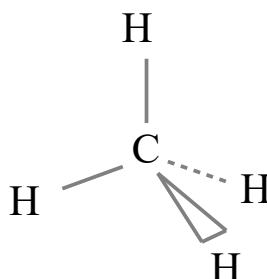
3º $ED = 4e^- \cdot 1(C) + 1e^- \cdot 4(H) = 8e^-$

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

5º $PN = \frac{ED - 2 \cdot PE}{2} = \frac{8 - 2 \cdot 4}{2} = 0 \text{ pares non enlazantes}$

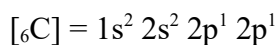


Segundo a TRPECV os catro pares electrónicos que están ao redor do C deben dispoñerse nunha estrutura tetraédrica, con ángulos de 109º, para que as repulsións sexan mínimas.



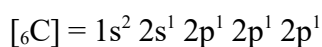
A estrutura tetraédrica, con ángulos de 109º, é compatible cos híbridos sp³, que tamén teñen esa xeometría.

Estrutura electrónica fundamental do C:

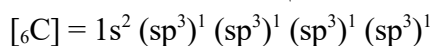


Para que os orbitais solapen e poidan dar lugar a enlaces deben ter un só electrón. Na estrutura electrónica fundamental do C só temos dous orbitais con electróns desapareados, por tanto só poderá dar lugar a dous enlaces.

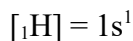
Para que poida formar catro enlaces o C debe promocionar un electrón do orbital 2s a un orbital 2p, que ten un pouco máis de enerxía, pero esta diferenza de enerxía verase compensada con fartura coa formación de enlaces.



Para xustificar os ángulos de enlace de 109° , nunha estrutura tetraédrica, debemos formar catro orbitais híbridos sp^3 a partir de catro orbitais atómicos puros, un 2s e tres 2p.

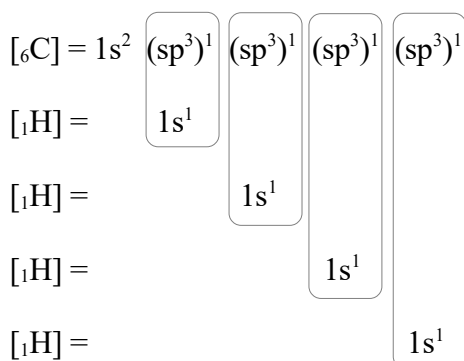


Os átomos de hidróxeno teñen unha configuración:

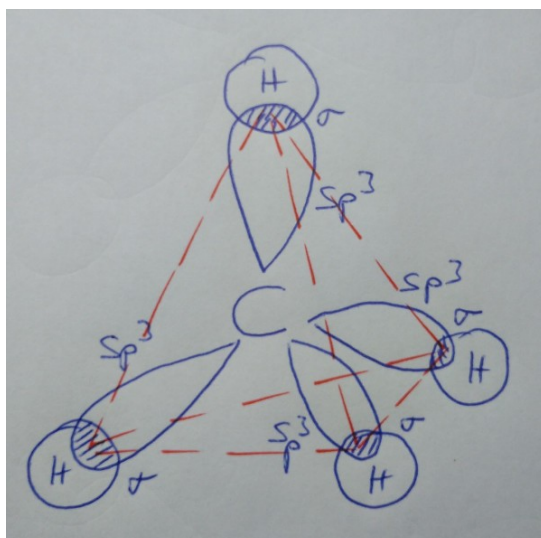


Por tanto o orbital 1s, que ten un electrón, pode formar enlaces por solapamento de orbitais.

Esquema de solapamentos:



Esquema da molécula:



d) NH_3

Primeiro necesitamos coñecer a xeometría desta molécula. Axudámonos da estrutura de Lewis e da TRPECV.

NH_3

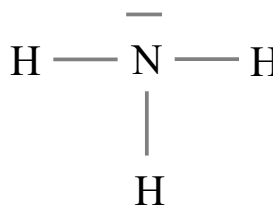
1º átomo central: N

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

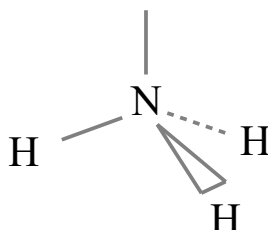
3º $\text{ED} = 5e^- \cdot 1(\text{N}) + 1e^- \cdot 3(\text{H}) = 8e^-$

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

5º $\text{PN} = \frac{\text{ED} - 2 \cdot \text{PE}}{2} = \frac{8 - 2 \cdot 3}{2} = 1 \text{ par non enlazante}$



Segundo a TRPECV os catro pares electrónicos que están ao redor do N deben dispoñerse nunha estrutura tetraédrica, con ángulos de 109° , para que as repulsións sexan mínimas.



A estrutura tetraédrica, con ángulos de 109° , é compatible cos híbridos sp^3 , que tamén teñen esa xeometría.

Estrutura electrónica fundamental do N:

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

Para xustificiar os ángulos de enlace de 109° , nunha estrutura tetraédrica, debemos formar catro orbitais híbridos sp^3 a partir de catro orbitais atómicos puros, un $2s$ e tres $2p$.

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

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

Os átomos de hidróxeno teñen unha configuración:

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

Por tanto o orbital $1s$, que ten un electrón, pode formar enlaces por solapamento de orbitais.

Esquema de solapamentos:

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

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

$$1s^1$$

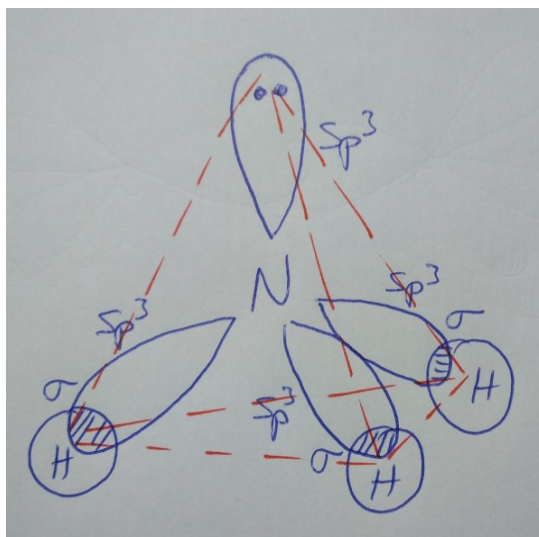
$$[{}_{1}\text{H}] =$$

$$1s^1$$

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

$$1s^1$$

Esquema da molécula:



e) H_2O

Primeiro necesitamos coñecer a xeometría desta molécula. Axudámonos da estrutura de Lewis e da TRPECV.

H_2O

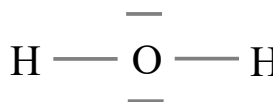
1º átomo central: O

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

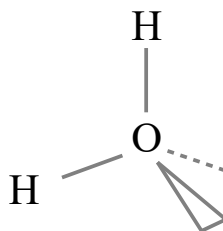
3º $\text{ED} = 6e^- \cdot 1(\text{O}) + 1e^- \cdot 2(\text{H}) = 8e^-$

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

5º $\text{PN} = \frac{\text{ED} - 2 \cdot \text{PE}}{2} = \frac{8 - 2 \cdot 2}{2} = 2 \text{ pares non enlazantes}$



Segundo a TRPECV os catro pares electrónicos que están ao redor do O deben dispoñerse nunha estrutura tetraédrica, con ángulos de 109° , para que as repulsiones sexan mínimas.



A estrutura tetraédrica, con ángulos de 109° , é compatible cos híbridos sp^3 , que tamén teñen esa xeometría.

Estrutura electrónica fundamental do O:

$$[8\text{O}] = 1s^2 2s^2 2p^2 2p^1 2p^1$$

Para xustificar os ángulos de enlace de 109° , nunha estrutura tetraédrica, debemos formar catro orbitais híbridos sp^3 a partir de catro orbitais atómicos puros, un 2s e tres 2p.

$$[8\text{O}] = 1s^2 \underbrace{2s^2 \quad 2p^2 \quad 2p^1 \quad 2p^1}$$

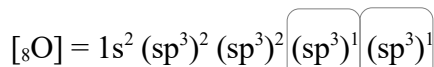
$$[8\text{O}] = 1s^2 (sp^3)^2 (sp^3)^2 (sp^3)^1 (sp^3)^1$$

Os átomos de hidróxeno teñen unha configuración:

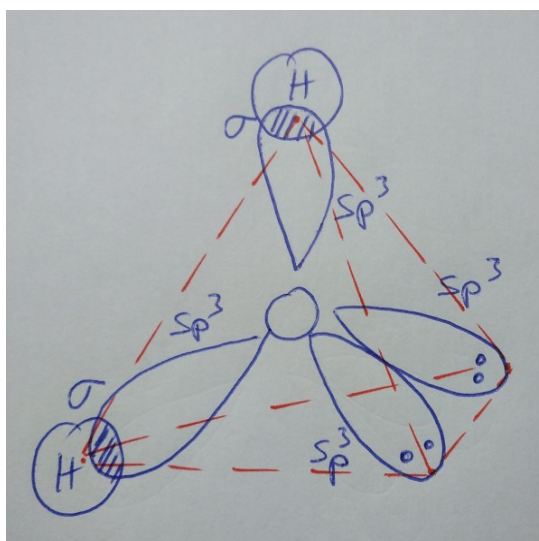
$$[1\text{H}] = 1s^1$$

Por tanto o orbital 1s, que ten un electrón, pode formar enlaces por solapamento de orbitais.

Esquema de solapamentos:



Esquema da molécula:



f) HCN

Primeiro necesitamos coñecer a xeometría desta molécula. Axudámonos da estrutura de Lewis e da TRPECV.

HCN

1º átomo central: C

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

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

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

$$5^\circ \text{ PN} = \frac{\text{ED} - 2 \cdot \text{PE}}{2} = \frac{10 - 2 \cdot 4}{2} = 1 \text{ par non enlazante}$$

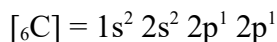


Segundo a TRPECV dous pares electrónicos ao redor do C, o enlace triplo contribúe como un para a TRPECV, deben dispoñerse nunha estrutura lineal, con ángulo de 180°, para que as repulsiones sexan mínimas.

A estrutura lineal, con ángulos de 180°, é compatible cos híbridos sp, que tamén teñen esa

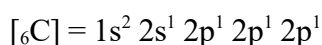
xeometría.

Estrutura electrónica fundamental do C:

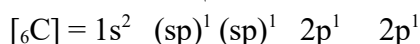
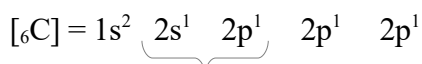


Para que os orbitais solapen e poidan dar lugar a enlaces deben ter un só electrón. Na estrutura electrónica fundamental do C só temos dous orbitais con electróns desapareados, por tanto só poderá dar lugar a dous enlaces.

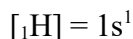
Para que poida formar catro enlaces o C debe promocionar un electrón do orbital 2s a un orbital 2p, que ten un pouco máis de enerxía, pero esta diferenza de enerxía verase compensada con fartura coa formación de enlaces.



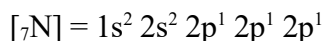
Para xustificar os ángulos de ligazón de 180°, nunha estrutura lineal, debemos formar dous orbitais híbridos sp a partir de dous orbitais atómicos puros, un 2s e un 2p.



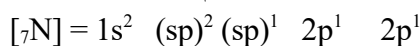
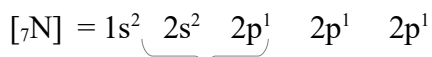
O átomo de hidróxeno ten unha configuración:



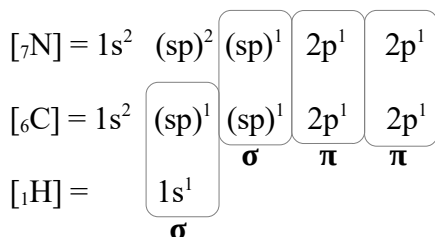
O átomo de nitróxeno ten unha configuración:



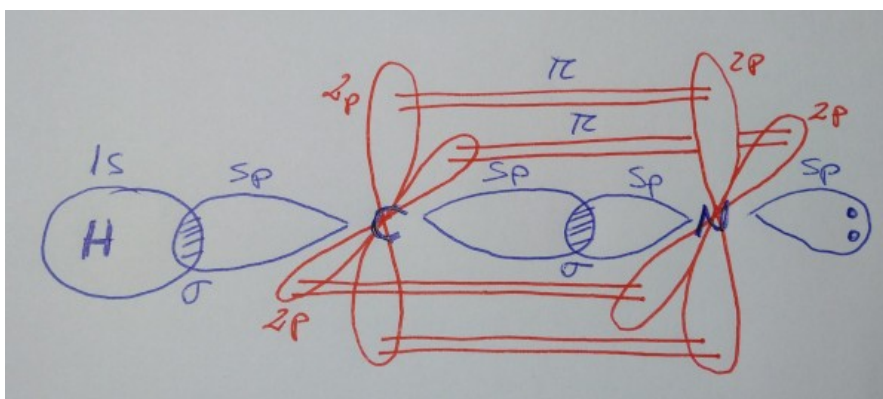
Sobre o nitróxeno hai un par non enlazante, que segundo a TRPECV debe estar o máis separado posible do triplo enlace para que as repulsiones sexan mínimas. Isto ocorre se a disposición do par non enlazante é lineal co resto da molécula, por tanto tamén podemos expor híbridos sp para o nitróxeno



Esquema de solapamentos:



Esquema da molécula:



g) CO₂

Primeiro necesitamos coñecer a xeometría desta molécula. Axudámonos da estrutura de Lewis e da TRPECV.

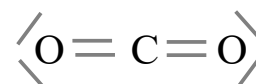
CO₂

1º átomo central: C

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

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

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

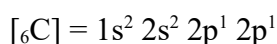


$$5^\circ \text{ PN} = \frac{\text{ED} - 2 \cdot \text{PE}}{2} = \frac{16 - 2 \cdot 4}{2} = 4 \text{ pares non enlazantes}$$

Segundo a TRPECV dous pares electrónicos ao redor do C, o enlace dobre contribúe como un para a TRPECV, deben dispoñerse nunha estrutura lineal, con ángulo de 180°, para que as repulsiones sexan mínimas.

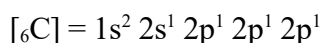
A estrutura lineal, con ángulos de 180°, é compatible cos híbridos sp, que tamén teñen esa xeometría.

Estrutura electrónica fundamental do C:

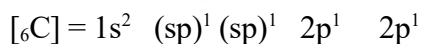
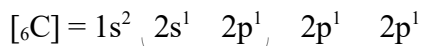


Para que os orbitais solapen e poidan dar lugar a enlaces deben ter un só electrón. Na estrutura electrónica fundamental do C só temos dous orbitais con electróns desapareados, por tanto só poderá dar lugar a dous enlaces.

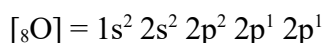
Para que poida formar catro enlaces o C debe promocionar un electrón do orbital 2s a un orbital 2p, que ten un pouco máis de enerxía, pero esta diferenza de enerxía verase compensada con fartura coa formación de enlaces.



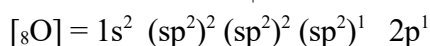
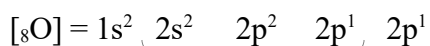
Para xustificar os ángulos de ligazón de 180°, nunha estrutura lineal, debemos formar dous orbitais híbridos sp a partir de dous orbitais atómicos puros, un 2s e un 2p.



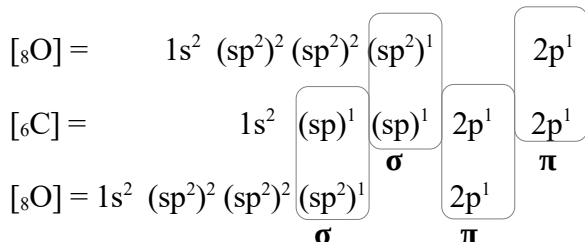
O átomo de osíxeno ten unha configuración:



Sobre o osíxeno hai dous pares non enlazantes, que segundo a TRPECV debe estar o máis separados posible do dobre enlace para que as repulsiones sexan mínimas. Isto ocorre se a disposición dos pares non enlazantes e o enlace dobre é trigonal plana, con ángulos de 120°, por tanto tamén podemos expor híbridos sp² para o osíxeno, que son compatibles con esa xeometría



Esquema de solapamentos:



Esquema de la molécula:

