

Representación de estructuras de Lewis. Procedimiento general

Para muchas moléculas e iones se pueden escribir sus estructuras de Lewis con facilidad. No obstante, es conveniente, en general, seguir el procedimiento que se explica a continuación, que va a ser ejemplificado con cuatro especies químicas:

CCl_4 , CO_2 , SO_4^{2-} y SF_4 .

Podéis seguir los ejemplos paso a paso en la siguiente tabla, donde también se contemplan los valores de carga formal de cada uno de los elementos de las distintas especies.

Carga formal (CF).

Es la diferencia entre los e^- de valencia de un átomo aislado y el n° de e^- asignado a ese átomo en la estructura de Lewis. Su cálculo supone asignar a cada átomo una carga ficticia, evaluándose el n° de e^- no compartidos y el n° de e^- que en teoría aporta en cada uno de los enlaces que forma. Si el valor obtenido coincide con el n° de e^- de valencia, la carga formal será nula. En caso contrario, la carga formal será positiva ó negativa, dependiendo del resultado de la correspondiente diferencia. En general,

$\text{CF} = n^\circ \text{ de } e^- \text{ de valencia del átomo libre} - (n^\circ \text{ de } e^- \text{ solitarios} + 1/2 n^\circ \text{ de electrones compartidos}).$

	CCl ₄	CO ₂	SO ₄ ²⁻
a) Cálculo del nº total de electrones de valencia de los átomos implicados.	(4 átomos de Cl x 7 e ⁻ de valencia/átomo) + (4 e ⁻ de un átomo de carbono) = 32 e ⁻ (Si se tratase de un anión, un número de electrones igual a la carga del mismo se debe añadir al nº de electrones de valencia calculado; si se tratase de un catión, se realizará de forma análoga una sustracción).	(2 x 6) + 4 = 16 (O) (C)	6 + (4 x 6) + 2 = 32 (S) (O) (carga ion)
b) Determinación del nº de electrones necesarios para completar el octeto.	5 átomos x 8 e ⁻ /átomo = 40 e ⁻	3 x 8 = 24	5 x 8 = 40
c) Cálculo del nº de electrones compartidos (b - a).	40 - 32 = 8 e ⁻ deben compartirse.	24 - 16 = 8	40 - 32 = 8
d) Distribución de cada átomo alrededor del átomo central. Generalmente, en especies químicas tipo AB _x , el átomo central es el menos electronegativo.	Cl Cl C Cl Cl	O C O	O O S O O
e) Representación de los enlaces sencillos. Dibujaremos un enlace sencillo (un par de e ⁻) entre el átomo central y cada uno de los átomos que lo rodean.	Cl Cl - C - Cl Cl	O - C - O	O O - S - O O
f) Evaluación de la existencia de posibles enlaces múltiples. Compararemos el nº de e ⁻ que deben compartirse (apartado c) con el nº de e ⁻ ya compartidos, dibujados en el apartado anterior (e).	Ya que el ejemplo que estamos desarrollando este número coincide en ambos casos, concluimos que ya se han distribuido todos los electrones que se comparten.	8 - 4 = 4. Posibilidades: a) un enlace sencillo y uno triple: O ≡ C - O b) dos enlaces dobles: O = C = O	8 - 8 = 0. En principio, no dibujaremos ningún enlace múltiple.
g) Distribución de electrones no compartidos alrededor de los átomos periféricos. Finalmente haremos cumplir a cada uno de los átomos periféricos la regla del octeto, distribuyendo de esta forma el resto de electrones (no compartidos).	e ⁻ disponibles: 32 e ⁻ compartidos: 8 e ⁻ no compartidos: 24 $\begin{array}{c} \overline{\text{Cl}} \\ \\ \overline{\text{Cl}} - \text{C} - \overline{\text{Cl}} \\ \\ \overline{\text{Cl}} \end{array}$	e ⁻ disponibles: 16 e ⁻ compartidos: 8 e ⁻ no compartidos: 8 A: IO ≡ C - $\overline{\text{O}}$ B: $\overline{\text{O}} = \text{C} = \overline{\text{O}}$	e ⁻ disponibles: 32 e ⁻ compartidos: 8 e ⁻ no compartidos: 24 $\left[\begin{array}{c} \overline{\text{O}} \\ \\ \overline{\text{O}} - \text{S} - \overline{\text{O}} \\ \\ \overline{\text{O}} \end{array} \right]^{2-}$
h) Evaluación de cargas formales. Energéticamente suelen estar favorecidas las estructuras en las que los átomos soportan cargas formales nulas o de un valor más bajo.	$\begin{array}{c} \overline{\text{Cl}} \\ \\ \overline{\text{Cl}} - \overset{0}{\text{C}} - \overline{\text{Cl}} \\ \\ \overline{\text{Cl}} \end{array}$	A: $\overset{+1}{\text{O}} \equiv \overset{0}{\text{C}} - \overset{-1}{\overline{\text{O}}}$ B: $\overset{-2}{\overline{\text{O}}} = \overset{0}{\text{C}} = \overset{-2}{\overline{\text{O}}}$ La estructura B está favorecida con respecto a la estructura A.	$\left[\begin{array}{c} \overset{-2}{\overline{\text{O}}} \\ \\ \overset{-2}{\overline{\text{O}}} - \overset{+2}{\text{S}} - \overset{-2}{\overline{\text{O}}} \\ \\ \overset{-2}{\overline{\text{O}}} \end{array} \right]^{2-}$ Se pueden reducir las cargas formales por formación de enlaces múltiples mediante la ampliación del octeto del átomo de azufre. $\left[\begin{array}{c} \overline{\text{O}} \\ \\ \overline{\text{O}} = \overset{0}{\text{S}} = \overline{\text{O}} \\ \\ \overline{\text{O}} \end{array} \right]^{2-}$