

TEORÍA DE LA HIBRIDACIÓN

EN ESTA PARTE ENCONTRARAS

¿Qué es la hibridación?

¿Por qué se requiere que el átomo de C hibridice?

Cuál nivel principal de energía participa en un enlace de C?

¿Cuántos electrones se requiere que tenga un orbital para poder enlazar con otro orbital?

¿Qué son los electrones de valencia?

¿Qué son orbitales no equivalentes?

de orbitales por nivel principal de energía

DEPENDIENDO DEL VALOR DE n , EL NÚMERO DE TIPOS DE ORBITALES ES:

n	TIPOS DE ORBITALES
1	1s
2	2s, 2p
3	3s, 3p, 3d
4	4s, 4p, 4d, 4f
5	5s, 5p, 5d, 5f
6	6s, 6p, 6d, 6f
7	7s, 7p, 7d

¿Qué nivel interviene en el enlace entre átomos?

- Recuerde que en un nivel principal hay subniveles y en estos orbitales y dentro de cada orbital hay máximo dos e-
- Según la Teoría del enlace de valencia, en la formación de enlaces entre dos átomos participan sus orbitales de la capa de valencia u orbitales del último nivel principal
- **Dos orbitales de combinan o superponen para formar un solo orbital**

¿En dónde se forman los enlaces?

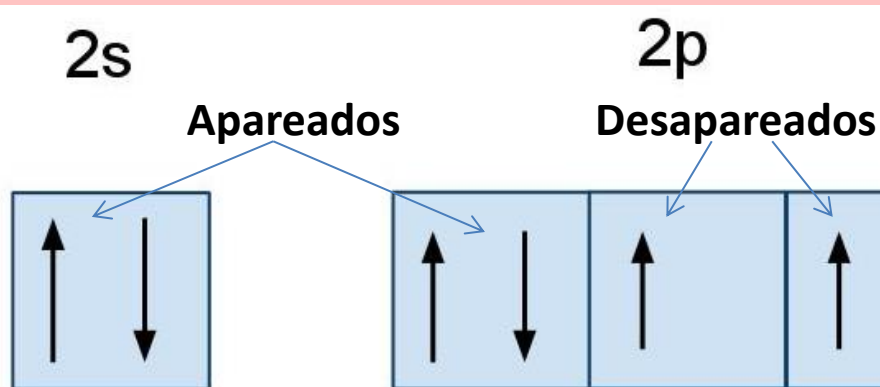
- Los enlaces formados entre dos átomos cualesquiera, ocurren entre electrones, específicamente entre electrones que se encuentran en la **última capa** de cada elemento. Dichos electrones reciben el nombre de **electrones de valencia**.
- **¿Qué son los electrones de valencia?**

Valencia covalente

- La valencia covalente es el número de enlaces covalentes que puede formar un átomo y se relaciona con el número de **electrones desapareados**
- Se le llama **electrón desapareado** a aquél que se encuentra solo en su orbital, se dice que el orbital está semi-ocupado, por lo tanto no hay otro electrón que gire en el espín opuesto de dicho orbital

¿Qué son orbitales desapareados?

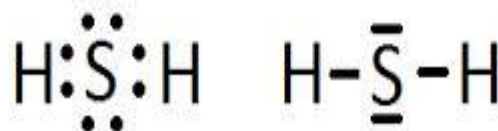
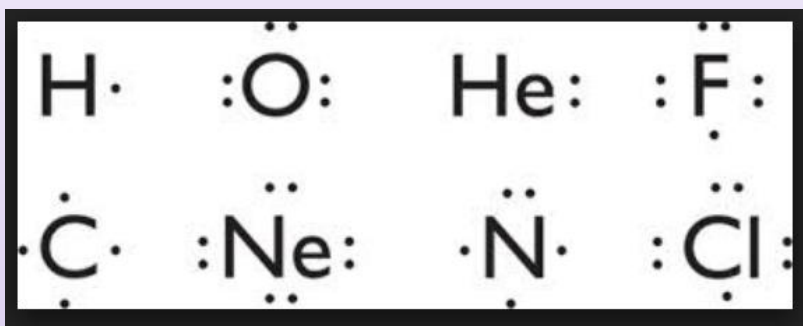
- Para que se produzca un enlace entre dos átomos, generalmente cada átomo tiene que tener un orbital con un electrón desapareado en un orbital. El orbital no debe tener dos electrones, solamente uno. No deben estar en parejas.



Pares electrónicos compartidos

- Los pares electrónicos se vuelven compartidos cuando un orbital parcialmente lleno de un átomo se sobrepone con otro orbital parcialmente lleno de otro átomo.
- Para ilustrar un elemento con sus electrones de valencia, se utiliza una estructura llamada estructura de Lewis, que indica precisamente sólo los electrones de la última capa del átomo

Estructura de Lewis de algunos átomos

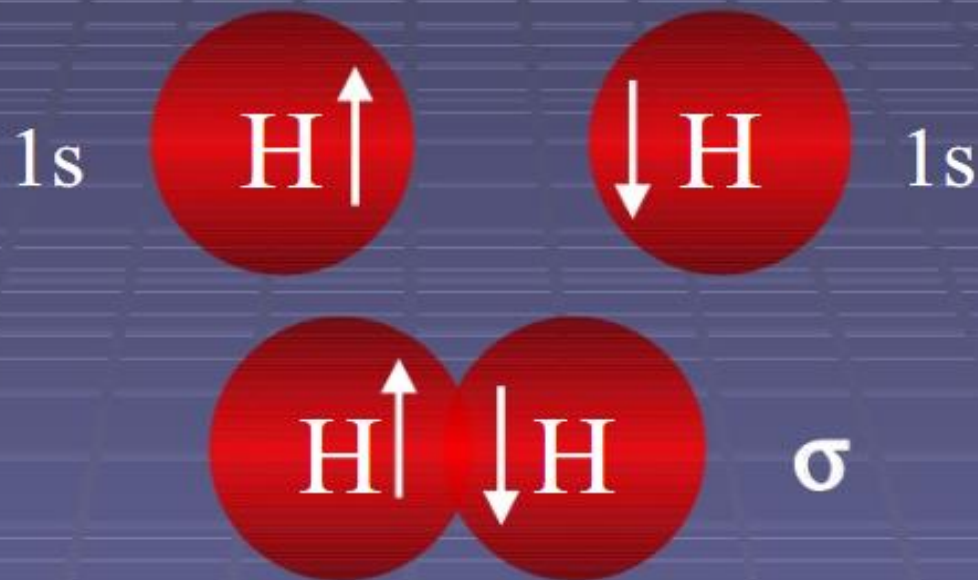


Estructura de Lewis de la molécula de sulfuro de hidrógeno

- Se representan los electrones del último nivel principal

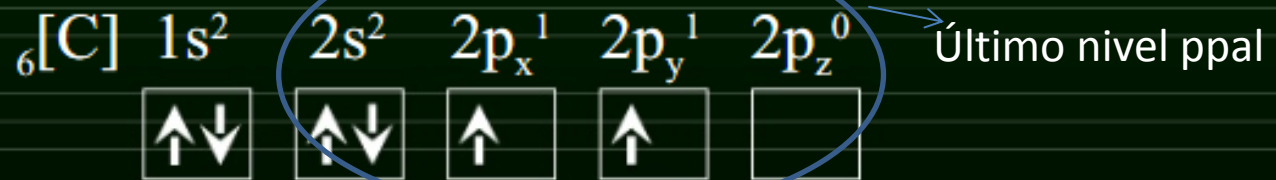
En el Hidrógeno

SOBREPOSICIÓN DE ORBITALES Y FORMACIÓN DEL ENLACE COVALENTE



Configuración electrónica del átomo de carbono

El átomo de carbono tiene el número atómico 6, en la tabla periódica de los elementos, lo cual implica que tiene 6 protones (cargas positivas en el núcleo y para ser eléctricamente neutro también deberá tener 6 electrones (cargas negativas), los cuales se distribuyen alrededor del núcleo, esta estructura se representa de la siguiente manera:



Donde ${}_6[\text{C}]$ representa el núcleo atómico, los coeficientes numéricos es el nivel de energía (n), las letras s y p son el tipo de orbital, los exponentes (1 y 2) son el número de electrones y las flechas representan el spin del electrón.

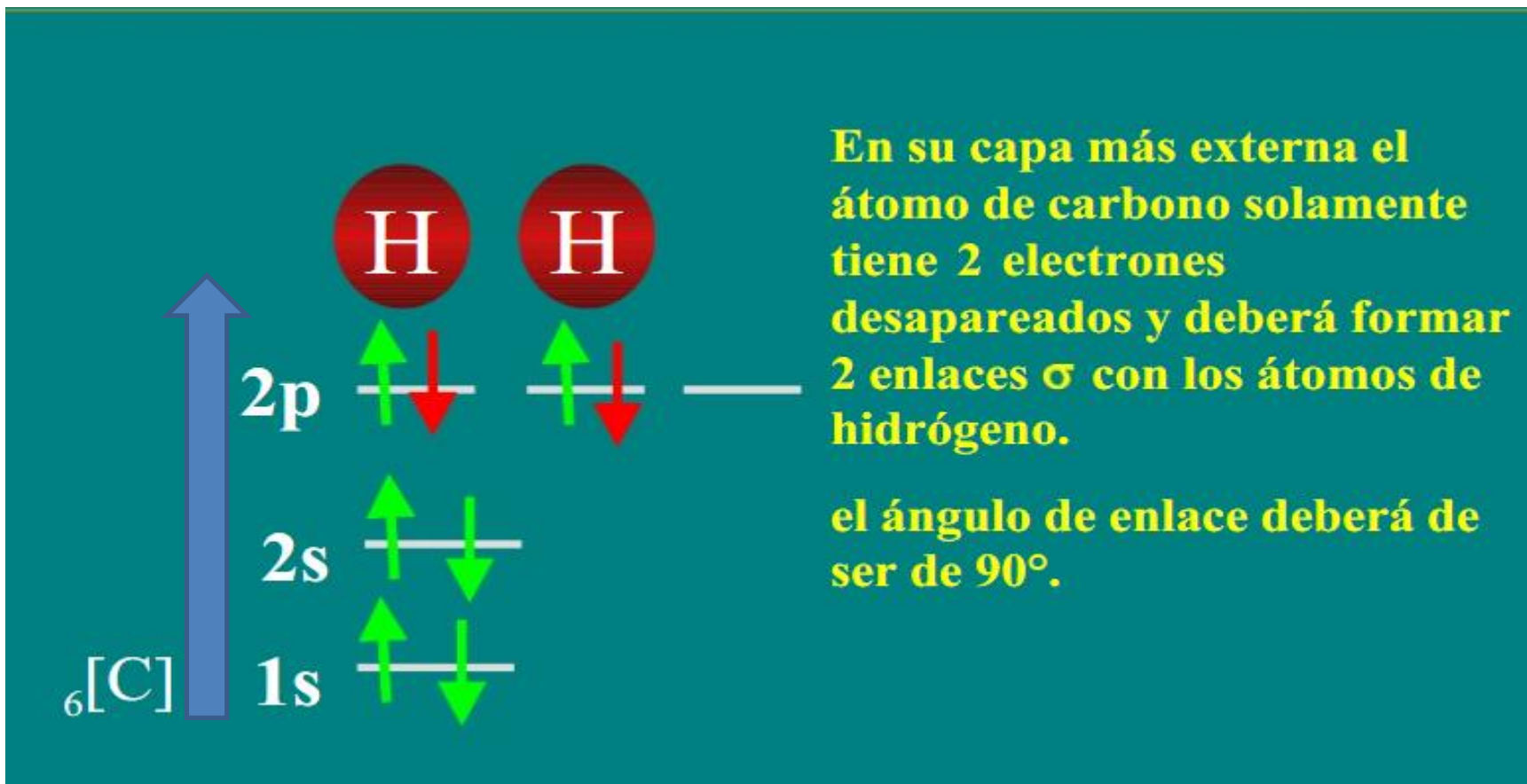
En condiciones “normales” la combinación del átomo de carbono con el H sería:



De acuerdo al concepto de enlace químico, el átomo de carbono podrá formar dos enlaces covalentes debido a que posee únicamente dos electrones desapareados.

Es decir que cuando el carbono se combina con el hidrógeno podrá formar la molécula CH_2 .

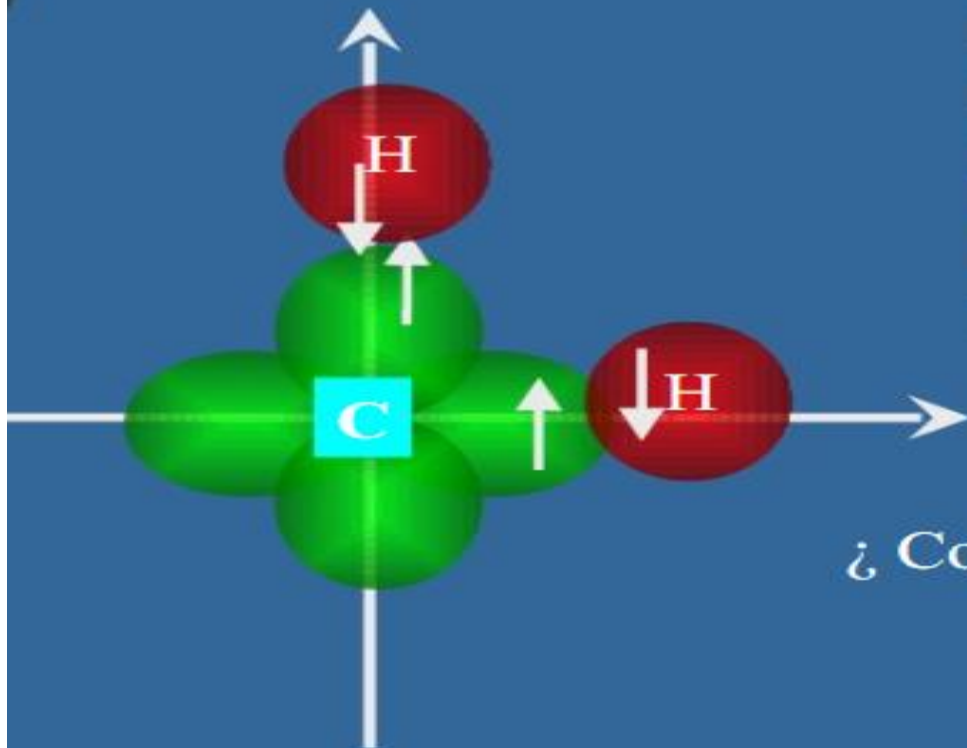
Esto sería lo que sólo podría esperarse al formar enlace con el H



Distribución electrónica del C: $1s^2, 2s^2, 2p_x, 2p_y$

¿ MOLÉCULA DE CH₂?

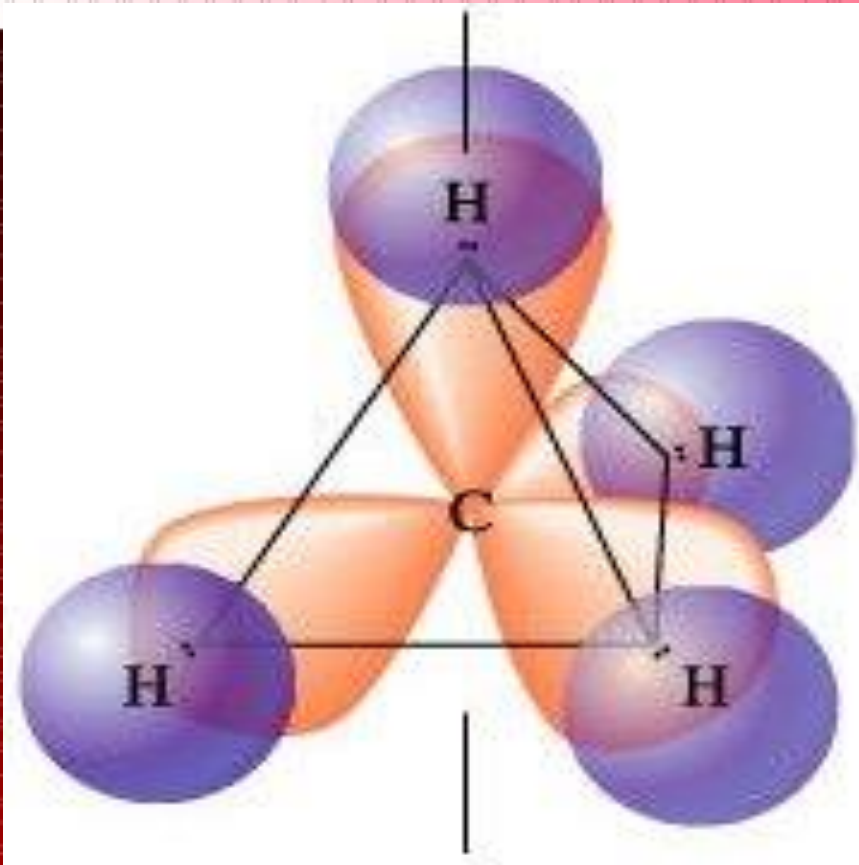
LA FÓRMULA
DEL COMPUESTO
DE CARBONO E
HIDRÓGENO SERÍA
CH₂ Y EL ÁNGULO
DE ENLACE DE 90 °



¿ Coincide con la realidad ?

¡NO!

ESTRUCTURA DEL METANO

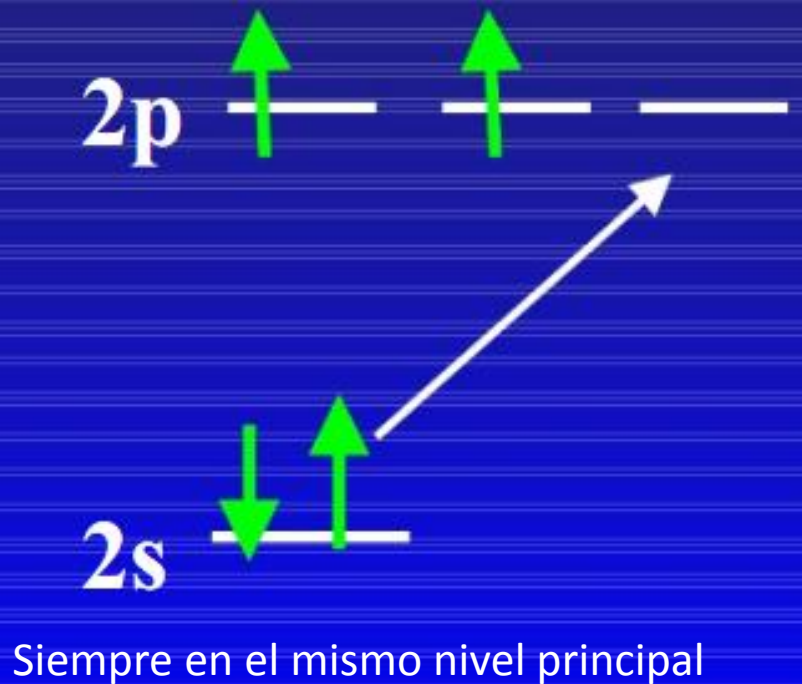
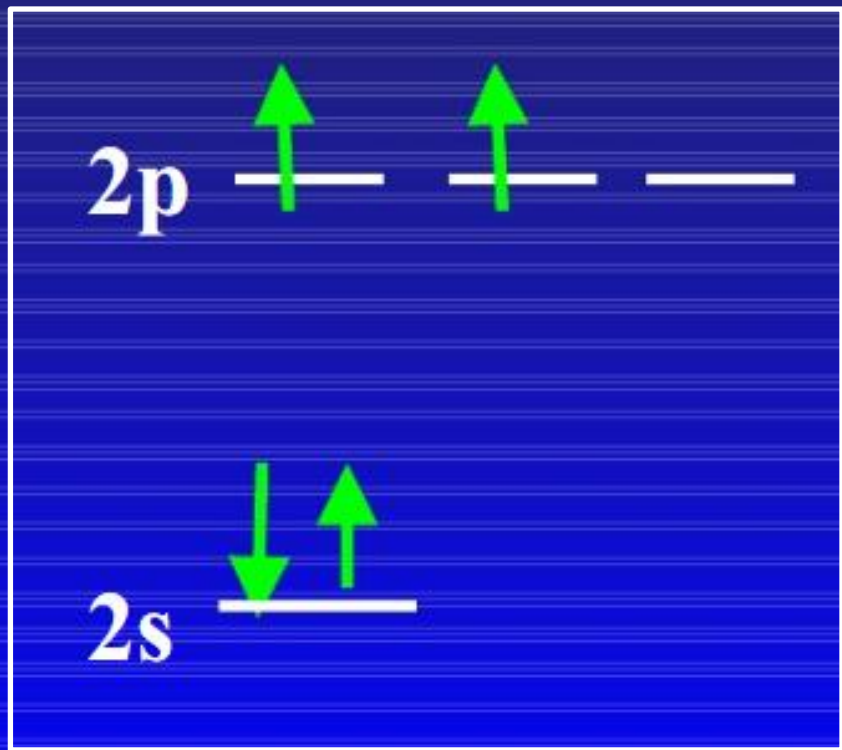


De estudios con rayos X se ha llegado a la conclusión de que la molécula de metano CH_4 , tiene una estructura tetraédrica es decir:
Ángulos de enlace $109^\circ 29'$
Distancia de enlace 119 pm

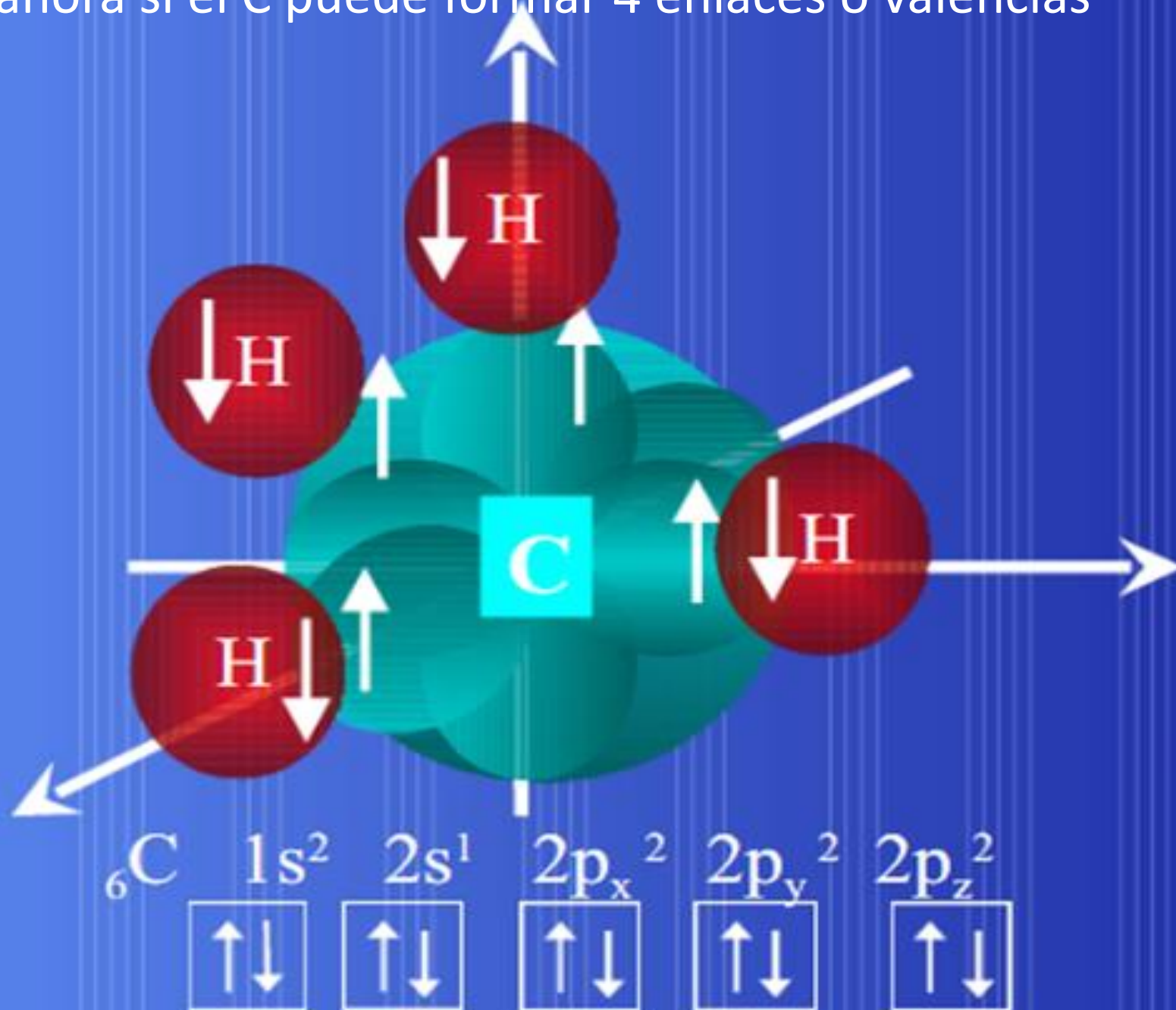
¿Cómo realmente se originan estas 4 valencias del C ?

TETRAVALENCIA DEL CARBONO

Para que el átomo de carbono sea tetravalente, se promueve un electrón del orbital 2s al orbital 2p vacío



Y ahora si el C puede formar 4 enlaces o valencias



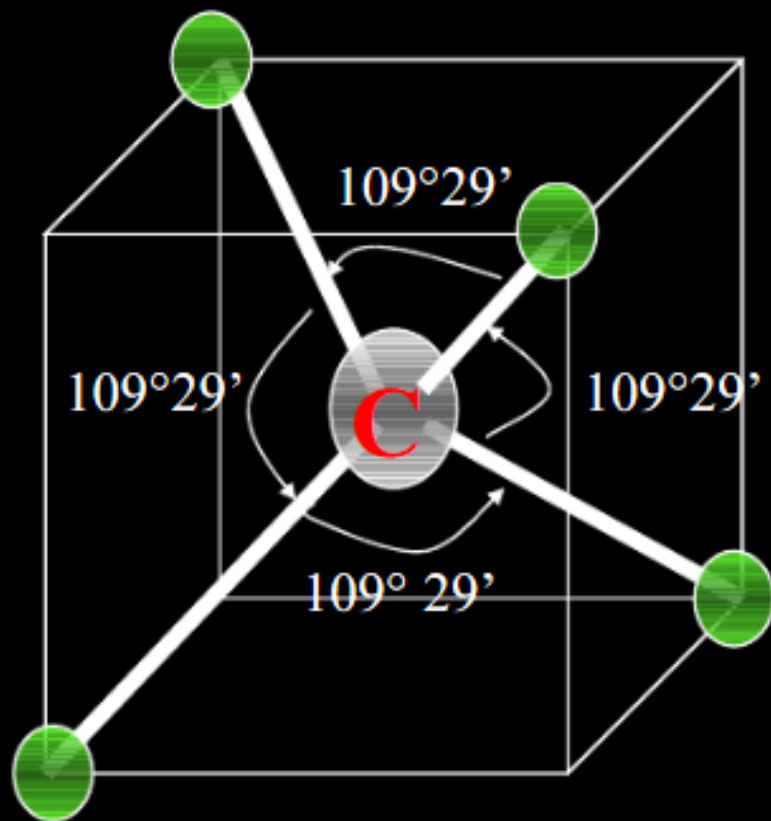
LA TEORÍA DE HIBRIDACIÓN (3)

2. La formación de los orbitales híbridos garantiza que:

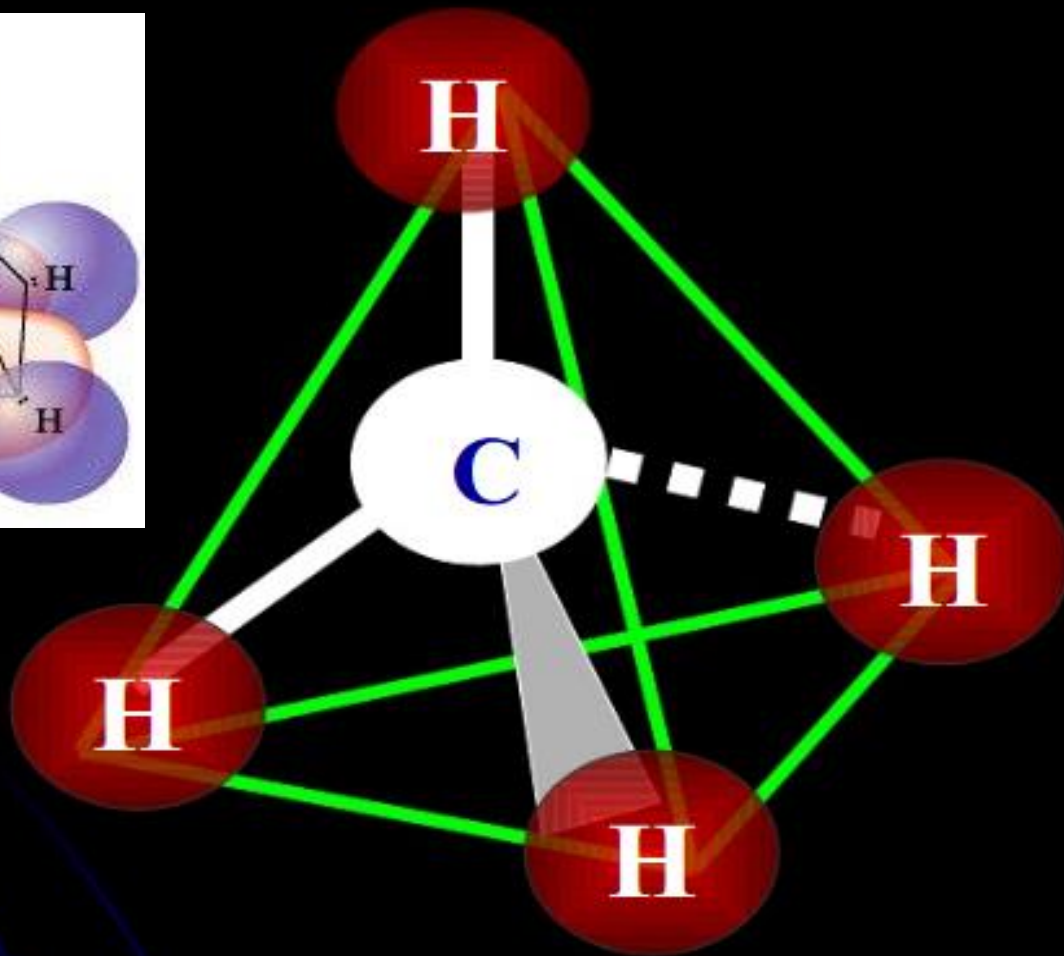
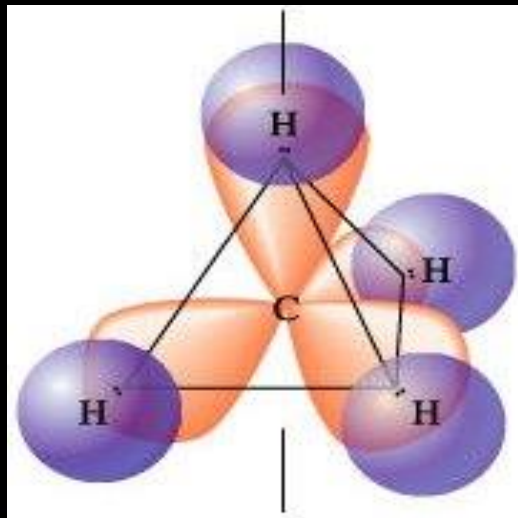
a) El átomo de carbono sea tetravalente.

b) Que los orbitales híbridos al tener la misma energía, la combinación del carbono con hidrógeno produzca átomos de hidrógeno químicamente equivalentes (iguales)

Distribución en el espacio de los orbitales híbridos sp^3



MOLÉCULA DE METANO

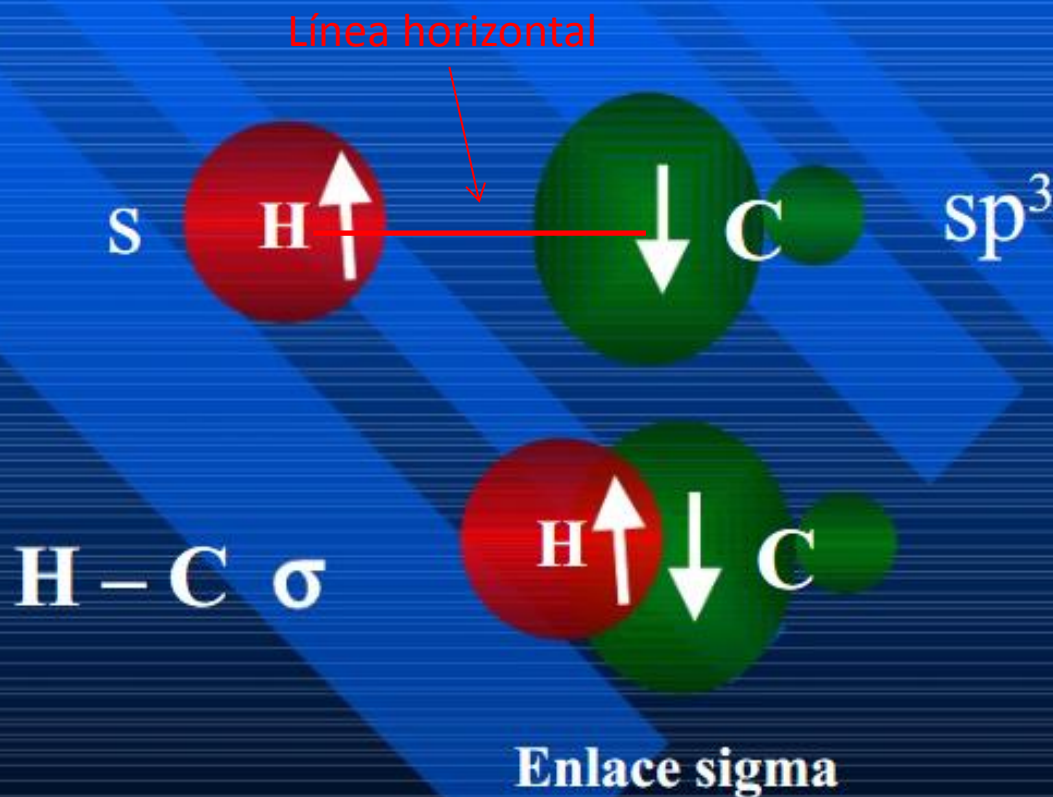


Enlaces sigma (s) y pi (p):

- La superposición o solapamiento entre dos orbitales se puede producir de dos formas distintas:
- Por **solapamiento o superposición frontal en el eje x**
- Es decir, sobre la línea horizontal imaginaria de unión que une los núcleos. Se dice que se produce un enlace de tipo sigma.
- Por **solapamiento o superposición lateral en los ejes z ó y**
- En este caso, hay dos zonas de solapamiento, una a cada lado de la línea de unión de los núcleos atómicos. Cuando esto ocurre, se dice que el enlace es de tipo pi

Enlace sigma: superposición frontal

FORMACIÓN DE ENLACE σ C – H.



- En concreto, la **hibridación** es el mecanismo que justifica la distribución espacial de los pares de electrones de valencia (lineales, triangulares planas y tetraédricas).
- El concepto de hibridación se usa para explicar un **esquema de enlace** en una molécula.

- La hibridación es la mezcla de orbitales atómicos de un átomo (comúnmente un átomo central) para generar un conjunto de nuevos orbitales atómicos, llamados orbitales híbridos.
- Los orbitales híbridos, que son orbitales atómicos que se obtienen cuando dos o más orbitales no equivalentes del mismo átomo (por ejemplo, orbitales s y p) se combinan, se usan para formar enlaces covalentes.

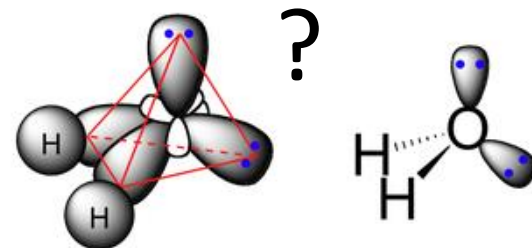
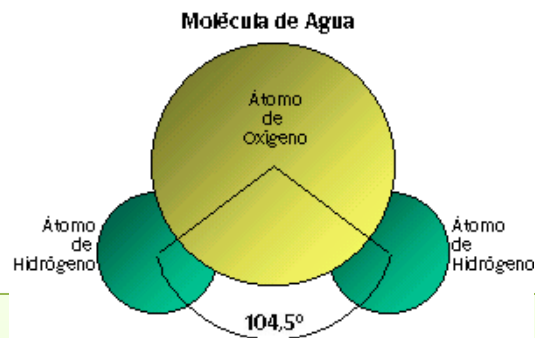
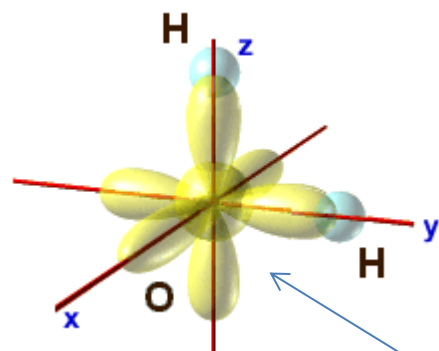
- La hibridación es la mezcla de al menos dos orbitales atómicos **no equivalentes**, por ejemplo, orbitales s y p.
- Por lo tanto, un orbital híbrido no es un orbital atómico puro (esto es, nativo). Los orbitales híbridos tienen formas muy diferentes de las de los orbitales atómicos originales.

- El # de orbitales híbridos generados es igual al número de orbitales atómicos puros que participan en el proceso de hibridación
- Aunque la hibridación requiere de energía se pasa a un estado de menor energía al final

- Se pueden unir orbitales híbridos con híbridos, u orbitales híbridos con orbitales no híbridos.
- El esquema de **hibridación** está aún en el contexto de la teoría **enlace valencia**; se supone que los electrones en algunas moléculas ocupan orbitales híbridos de los átomos individuales

¿El agua presentará hibridación?

- El átomo de O en el H₂O también tiene cuatro pares de electrones. Así que se podría esperar que el átomo de O también presente hibridación sp³.
- Sin embargo, la evidencia espectroscópica sugiere que los orbitales enlazados del O (que se usan par formar los enlaces O-H) son orbitales 2p no híbridos más bien que híbridos sp³. Esto **podría** significar que el átomo de O en el H₂O no está hibridado. Esto aún está en discusión.



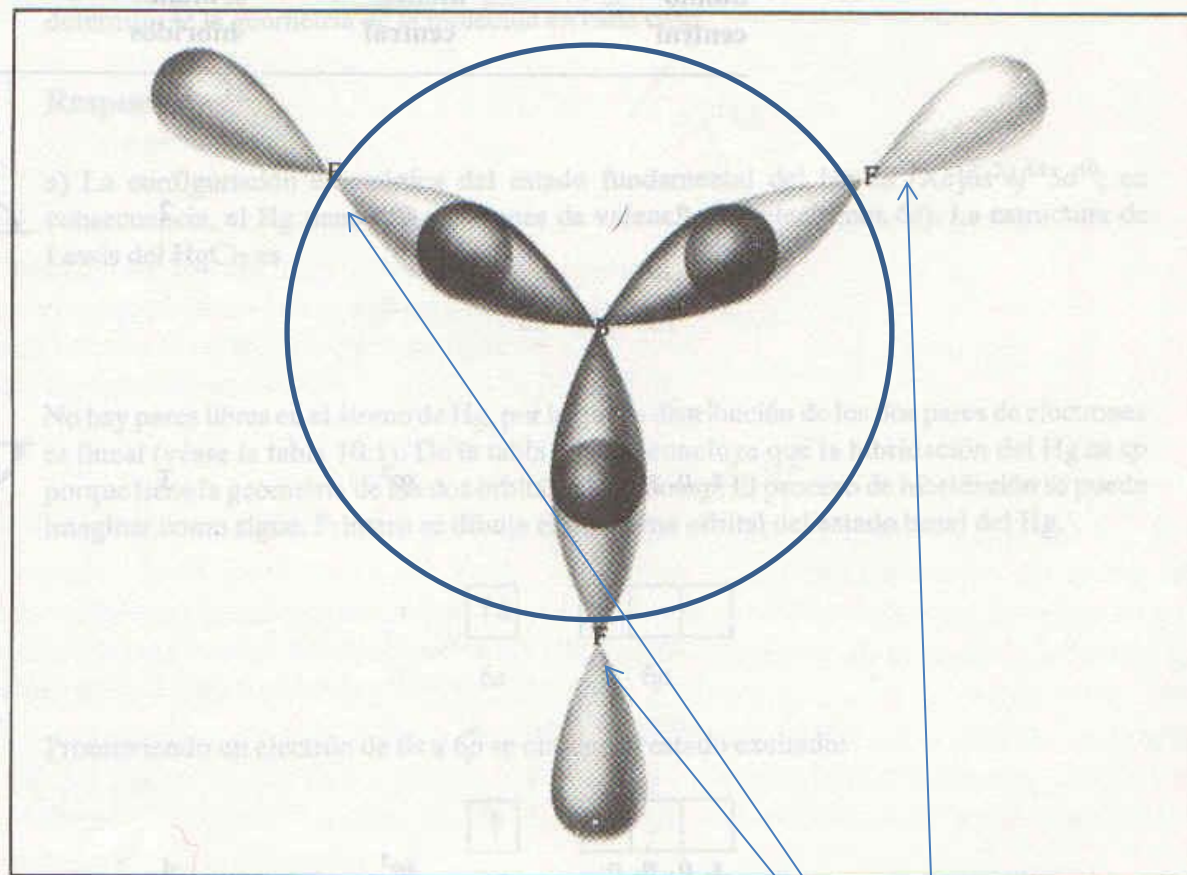
- Si esto es verdad, cabe preguntar por qué el ángulo HOH no es de 90° dado que los orbitales p son perpendiculares entre sí. La razón es que en la molécula de H_2O los dos enlaces O-H necesitan separarse para evitar la aglomeración de los átomos de H en el mismo espacio (situación energéticamente desfavorable). En esto tiene que ver la repulsión entre pares de electrones apareados.
- En consecuencia, el ángulo de enlace aumenta con respecto al predicho de 90° a 104.5° .

HIBRIDACIÓN Y LA REGLA DEL OCTETO

- Es probable que haya notado una interesante conexión entre la hibridación y la regla del octeto. Independientemente del tipo de hibridación, un átomo que empieza con **1 orbital s** y **3 orbitales p** poseerá **4 orbitales híbridos**, suficientes para acomodar un total de **ocho electrones** en un compuesto.
- Para los elementos del segundo periodo de la tabla periódica, ocho es el número máximo de electrones que pueden acomodar estos elementos. Ésta es la razón por la que la regla del octeto por lo general se cumple en los elementos del segundo periodo.

- La situación es diferente para un átomo de un elemento del tercer periodo. Si sólo se usan los orbitales 3s y 3p del átomo para formar orbitales híbridos en una molécula, entonces se cumple la regla del octeto. En algunas otras moléculas el mismo átomo puede usar uno o más orbitales 3d, además de los 3s y 3p, para formar orbitales híbridos.
- En estos casos no se cumple la regla del octeto.

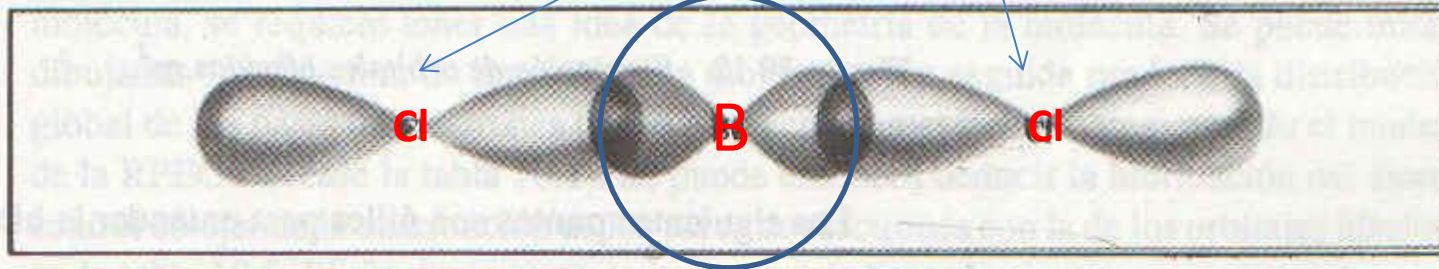
- HACER ÉNFASIS QUE LOS 4 SP³ SON DEL ÚLTIMO NIVEL Y SE ACOMODAN 8e-
- <http://quimicaitc.tripod.com/unidad1/hibridaciones.htm>



Traslape de orbitales híbridos sp^2 del átomo de boro con los orbitales 2p de los átomos de flúor. La molécula de BF_3 es plana y todos los ángulos FBF son de 120° .

- NOTAR QUE LA SP2 ES PLANAR Y QUE POR LOS EXTREMOS SE PUEDE ENLAZAR LINEAL Y PLANARMENTE

sp en el BCl_2



La geometría lineal del BeCl_2 se puede explicar mediante la suposición de que el Be se hibrida en sp, los dos orbitales híbridos sp se traslapan con los dos orbitales 3p del cloro para formar dos enlaces covalentes.

- Notar el enlace lineal en los extremos