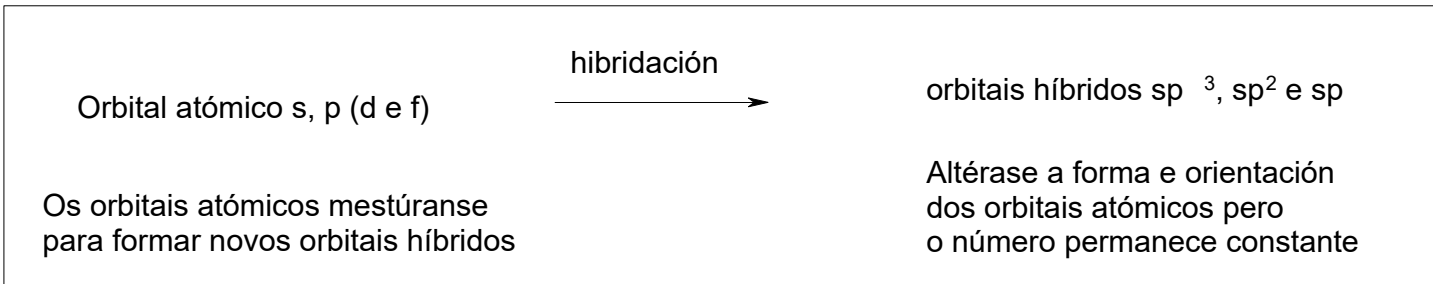
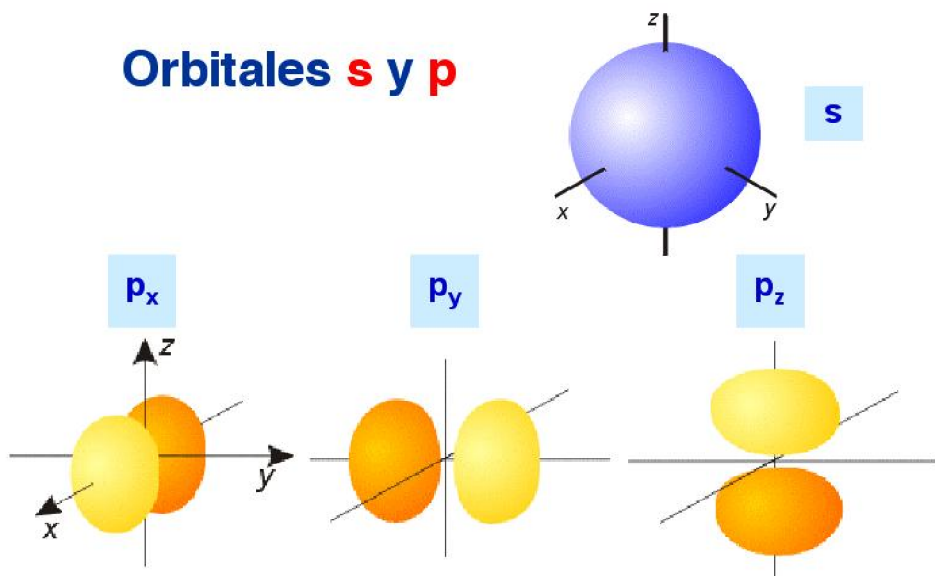


Tema 4 Orbitais Moleculares



Orbitales s y p



JM G. Zorrilla 2000

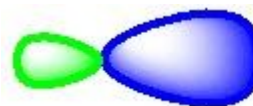
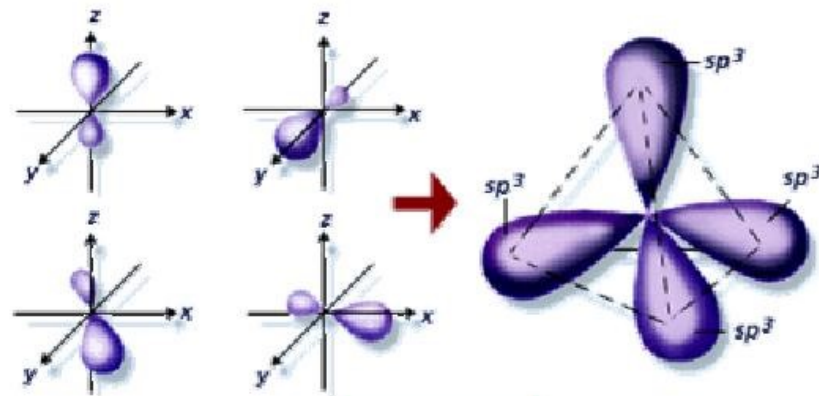


diagrama de contorno de densidad electrónica de un orbital híbrido sp^3

Formación de los orbitales híbridos sp^3



4 orbitais sp^3

Hibridación \longrightarrow

Hibridación de orbitais

Nalgunhas moléculas apréséntase o problema de explicar como a partir de orbitais atómicos diferentes pódense formar ligazóns idénticas. Hai que supor que durante a reacción se produce un proceso de hibridación ou recombinación de orbitais atómicos puros, resultando uns novos orbitais atómicos híbridos.

Estes orbitais están caracterizados por:

1. Prodúcese o mesmo número de orbitais híbridos ca orbitais atómicos puros de partida.
2. Son todos iguais, enerxeticamente e formalmente. Só se diferencian na súa orientación espacial.
3. Para que poida existir hibridación, a enerxía dos orbitais atómicos de partida debe ser moi similar.
4. Os ángulos entre eles son iguais.

Pode haber diferentes combinaciones de orbitales atómicos

Esa simboloxía indica o número de orbitales atómicos puros que se están combinando e o tipo de cada un de eles.

sp	significa que se combina un orbital s cun p
sp²	significa que se combina un orbital s con dous p
sp³	significa que se combina un orbital s con tres p
sp³d	significa que se combina un orbital s , tres p e un d
sp³d²	significa que se combina un orbital s , tres p e dous d

Formas xeométricas



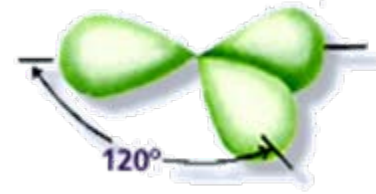
Lineal

sp



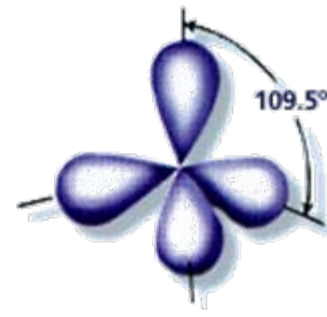
Trigonal planar

sp^2



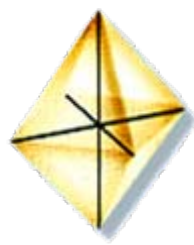
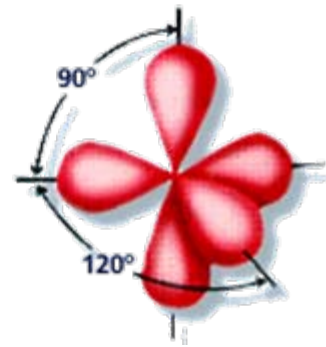
Tetraedra

sp^3



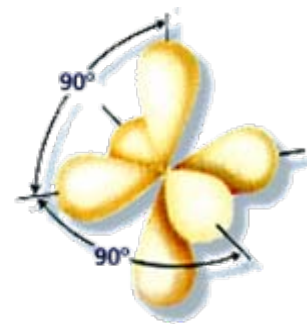
Trigonal bipyramidal

dsp^3

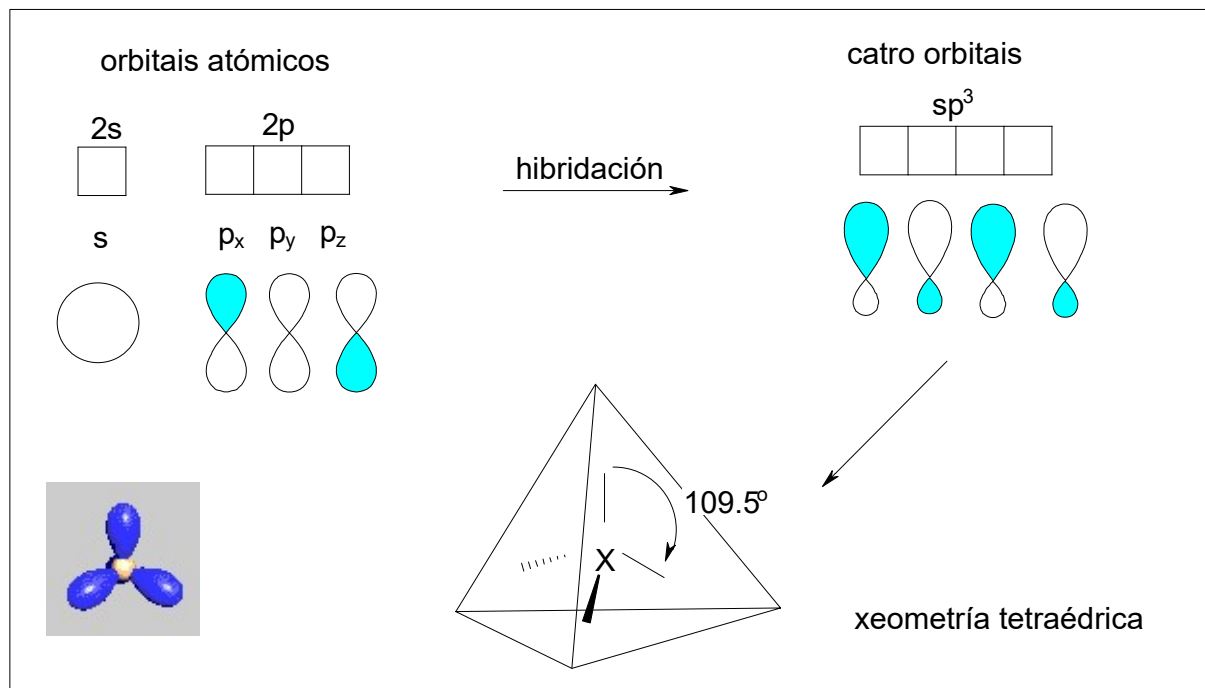


Octaedra

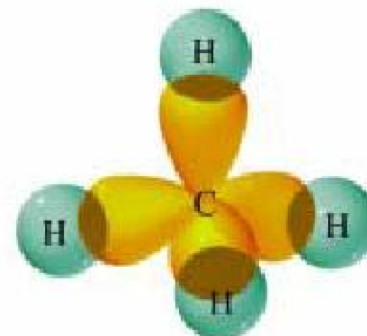
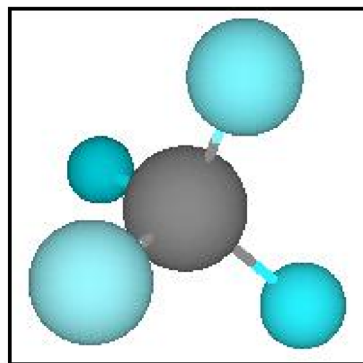
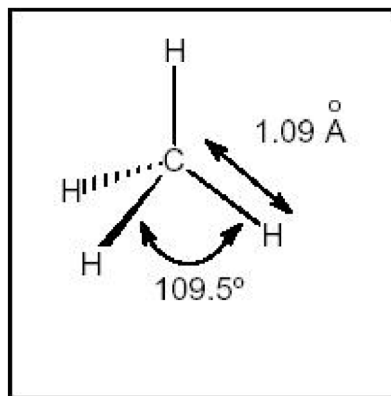
d^2sp^3



Formación da hibridación sp^3



Distancias y ángulos de enlace en la molécula de metano



Formación da hibridación sp^2

hibridación

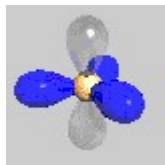
tres orbitais

orbitais atómicos

2s



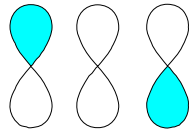
s



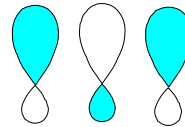
2p



p_x p_y p_z

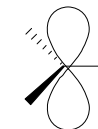


sp^2

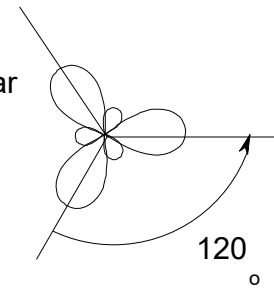


orbital baleiro

2p

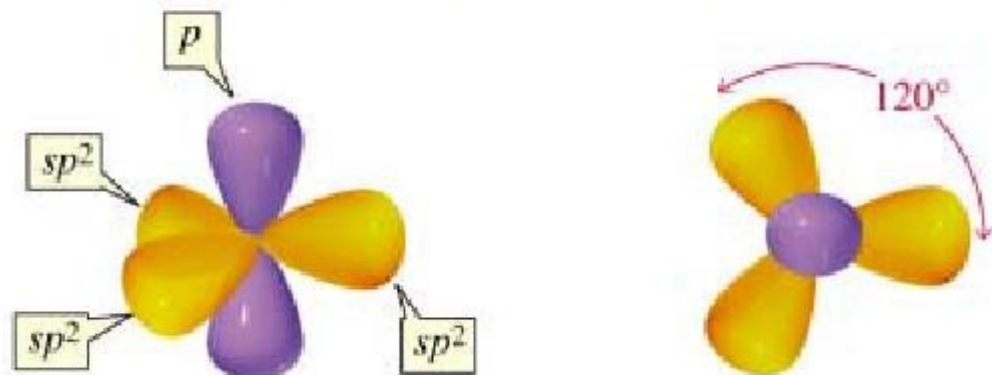


xeometría planar



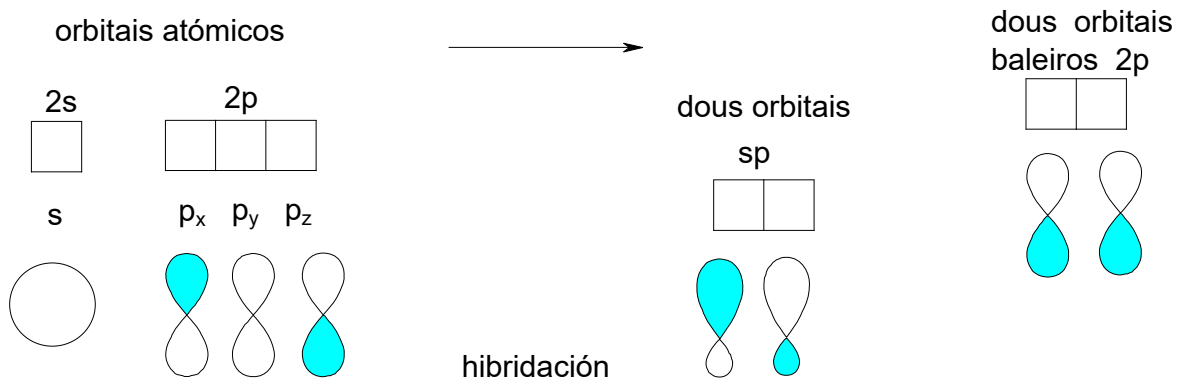
120°

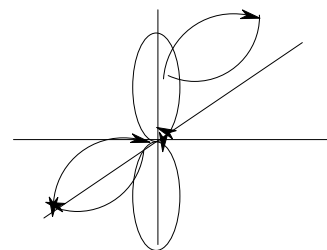
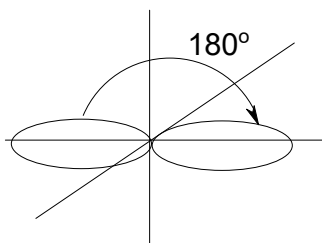
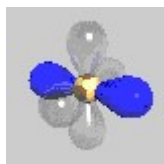
Vista frontal y vista superior de un átomo de carbono con hibridación sp^2



<http://es.geocities.com/quimicorganica>

Formación da hibridación sp

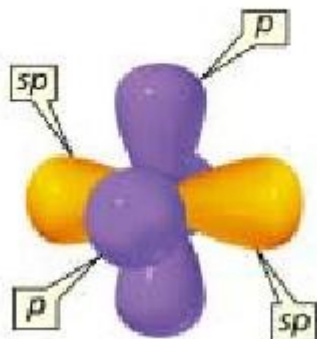




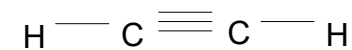
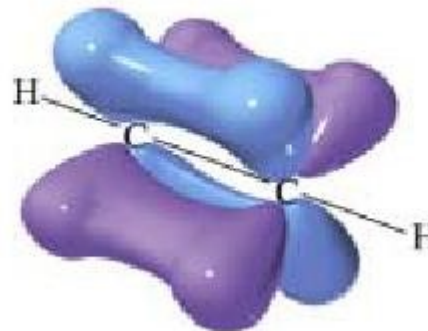
geometría lineal

Configuración orbital de un átomo de carbono con hibridación sp

Densidad electrónica π en la molécula de acetileno

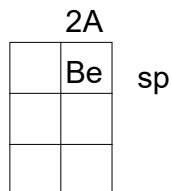


<http://es.geocities.com/quimicorganica>



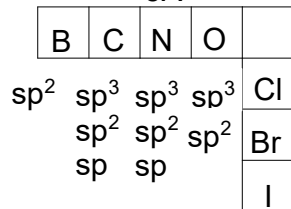
etino o acetileno

Hibridaciones sp^3 , sp^2 e sp



sp

3A 4A 5A 6A 7A



sp²

sp³

sp³

sp³

sp³

sp²

sp³

sp³

sp³

sp²

sp³

sp³

sp²

sp³

sp³

sp²

sp³

tipo e número de ligazóns

4 ligazóns sinxelas

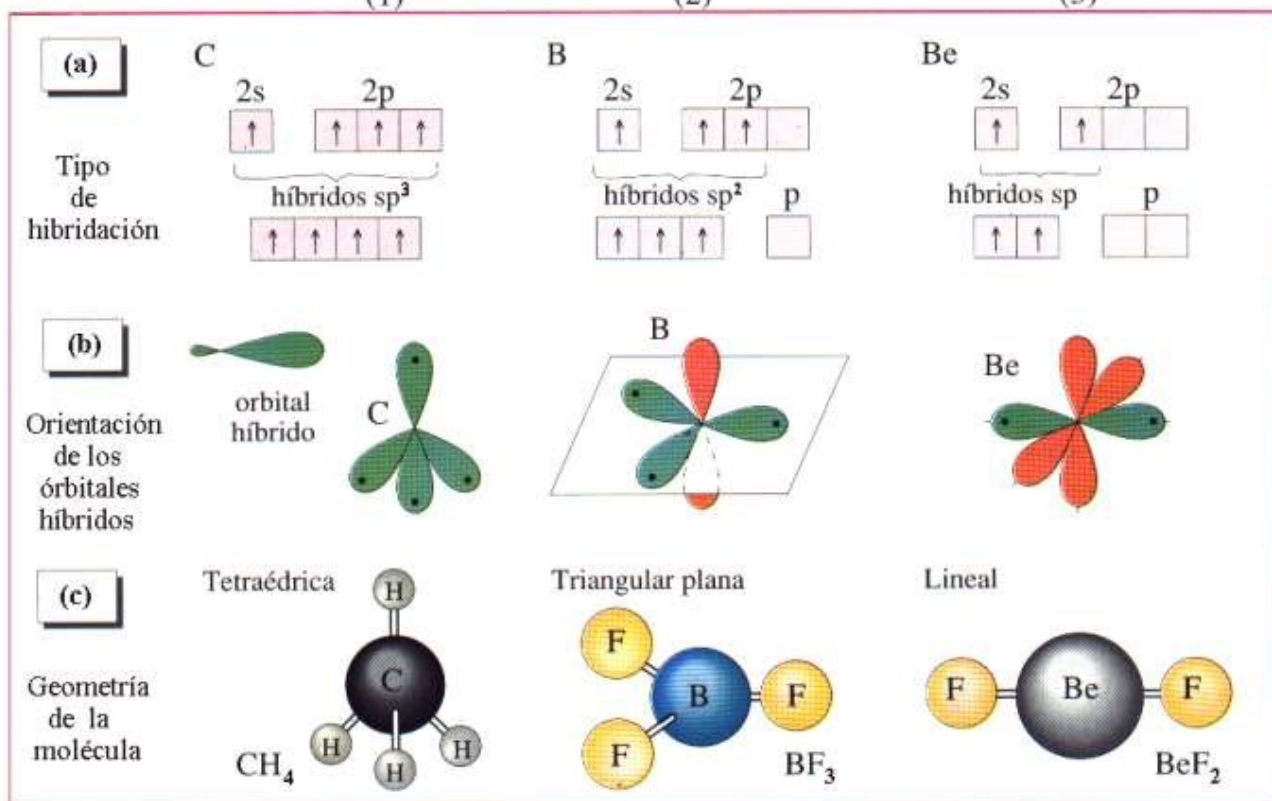
Unha ligazón dupla e 2 sinxelas

Unha ligazón tripla e 1 sinxela

(1)

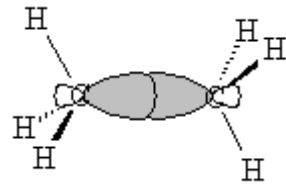
(2)

(3)

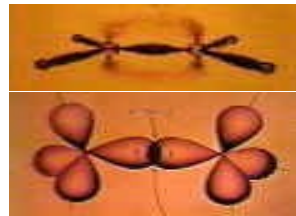


Combinación de orbitais atómicos. Orbitais α (sigma) e π (pi):

Enlace sinxelo formado por unha ligazón σ na molécula de etano

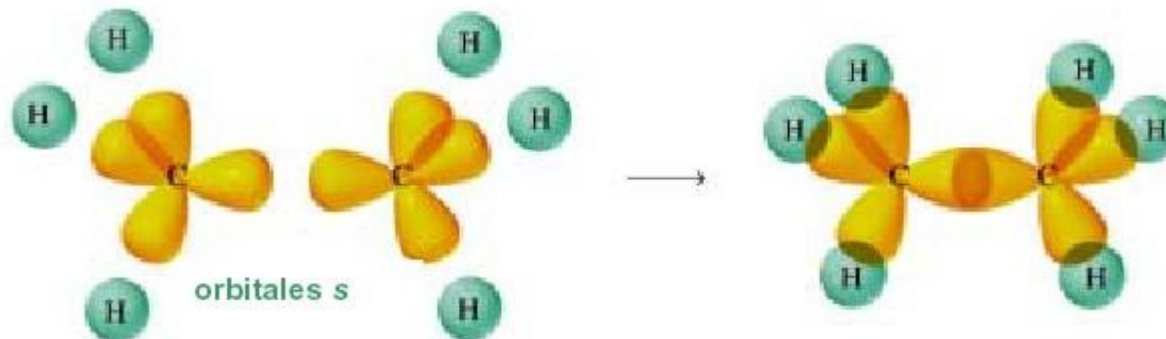


↑
enlace sigma formado por
dous orbitais sp³ - sp³



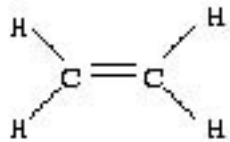
↑
enlace sigma formado por
dous orbitais sp³ - sp³

Formación de enlaces en la molécula de etano



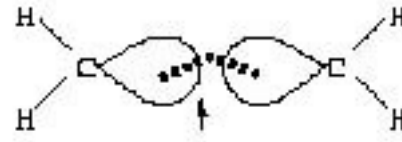
<http://es.geocities.com/quimicorganica>

Ligazóns dupla formada por un enlace σ e un enlace π na molécula de eteno (etileno)

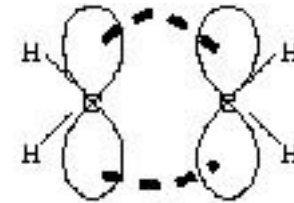


el doble enlace
consiste de dos
enlaces diferentes

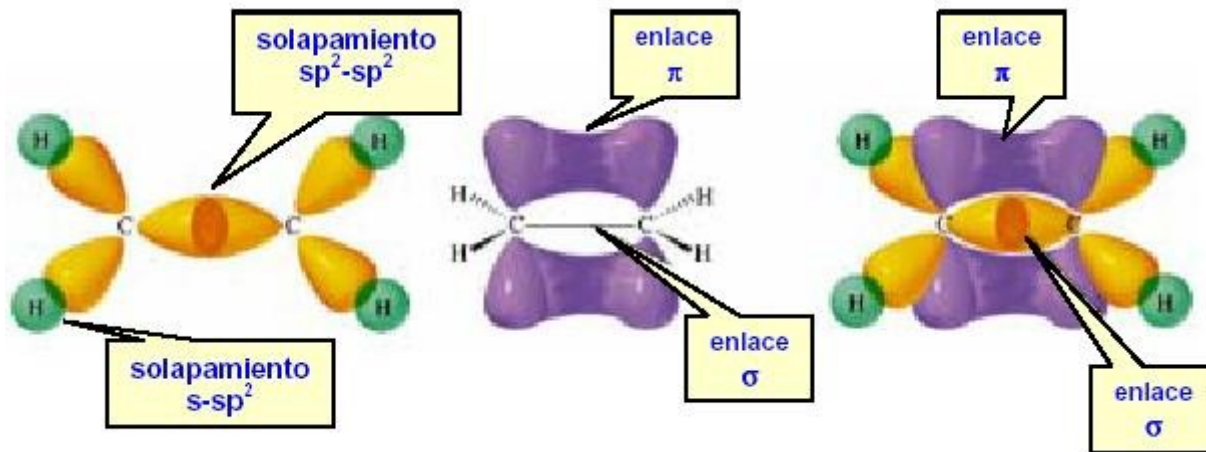
etileno tiene
un doble enlace



enlace sigma formado
por dos orbitales
híbridos sp^2

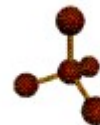
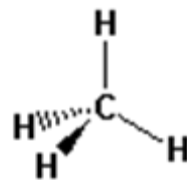
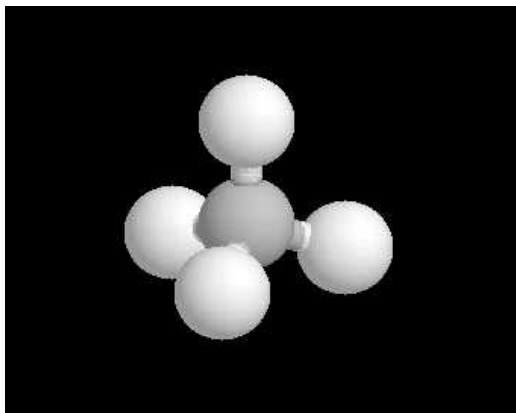
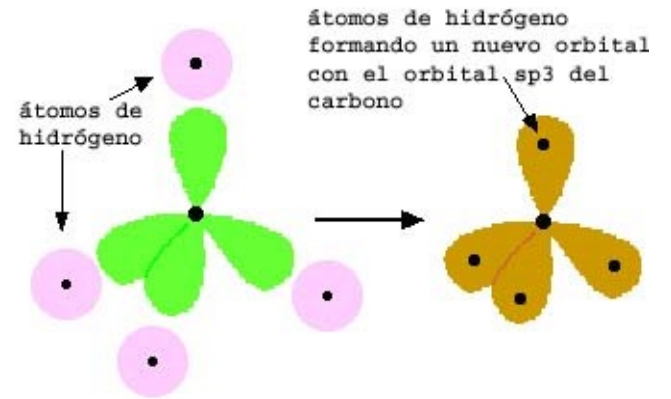
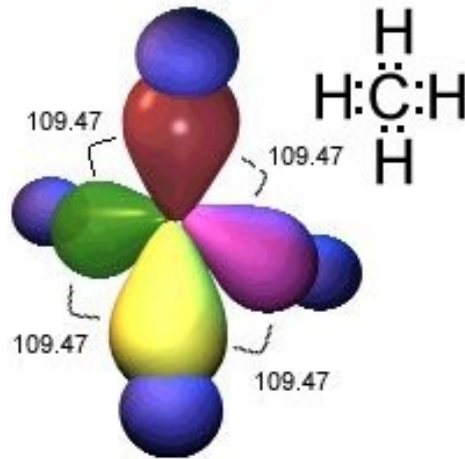
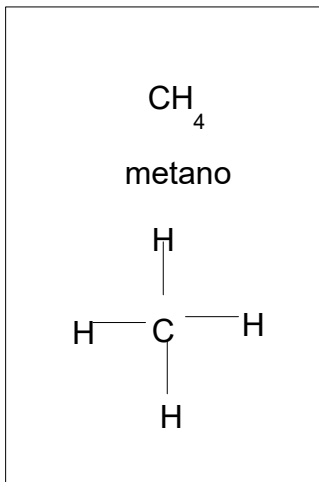


enlace pi formado por
dos orbitales vacíos p



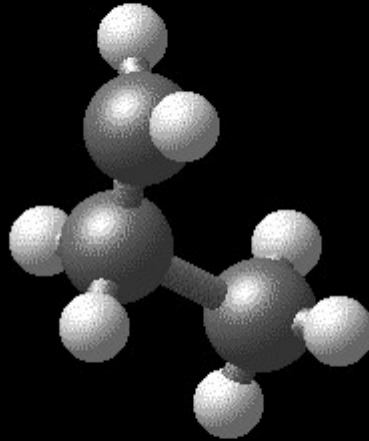
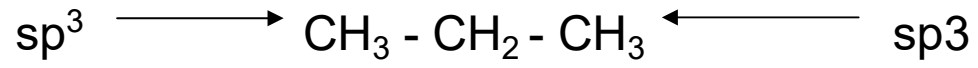
<http://es.geocities.com/quimicorganica>

Exemplos de hibridación sp^3 molécula de metano



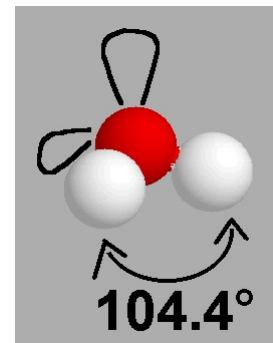
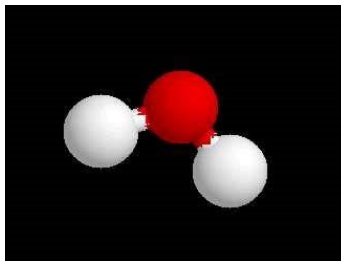
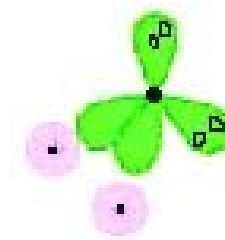
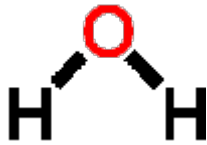
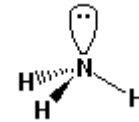
Propano

sp³

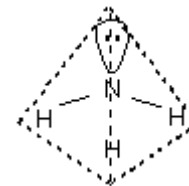
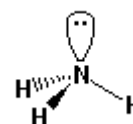
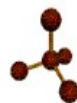
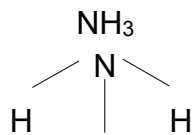


Molécula de auga (xeometría tetraédrica)

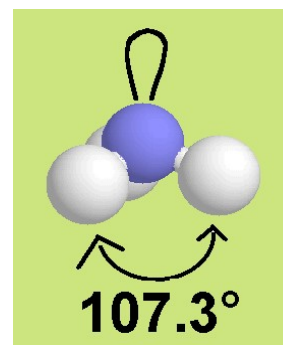
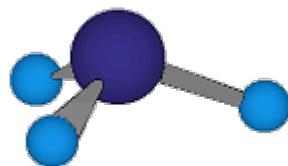
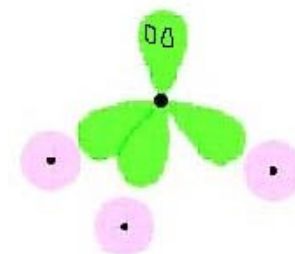
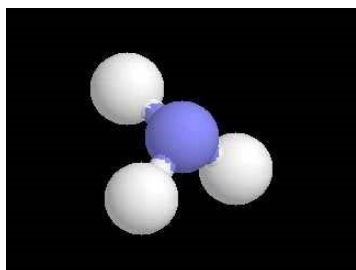
H₂O



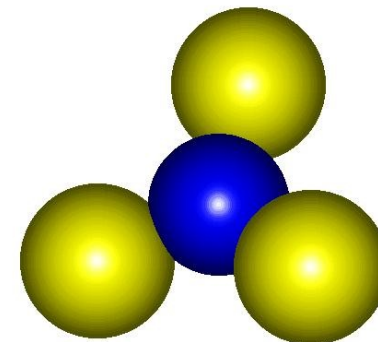
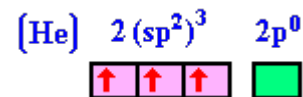
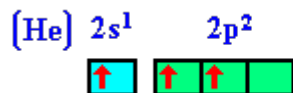
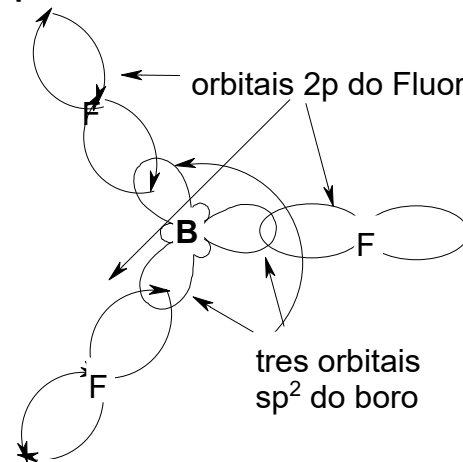
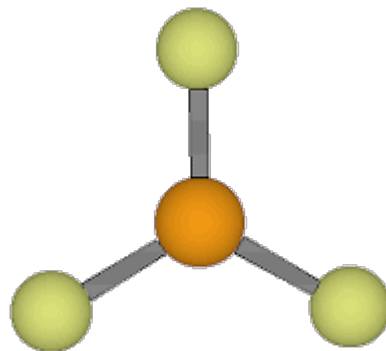
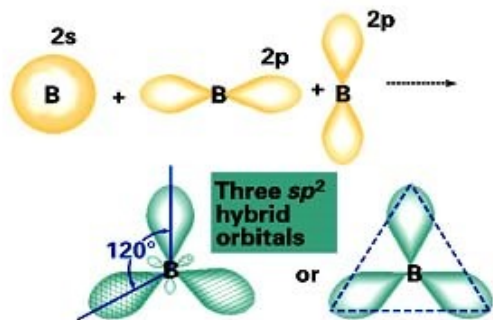
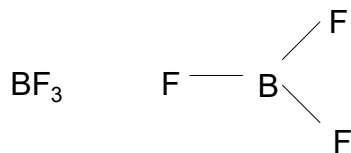
Molécula de amoníaco (xeometría tetraédrica)



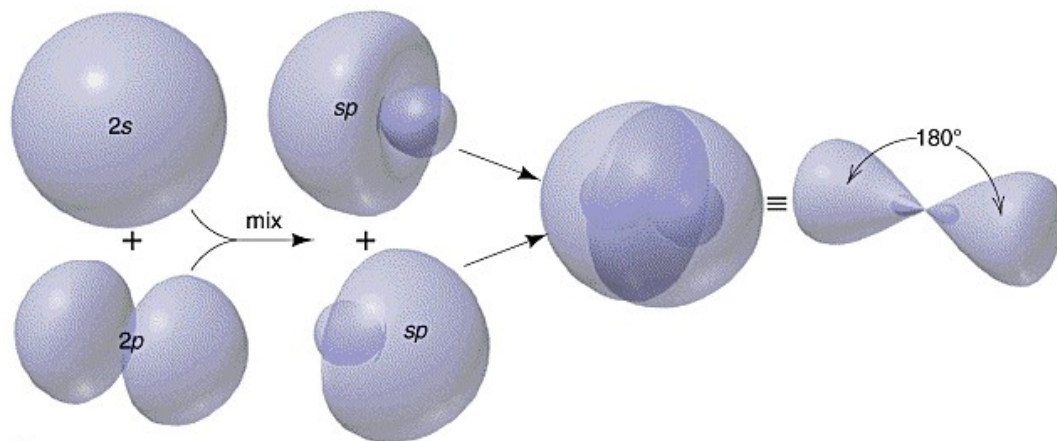
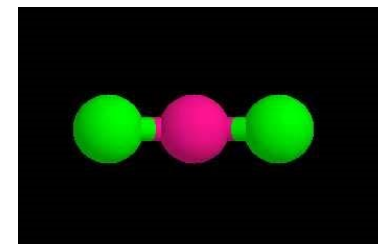
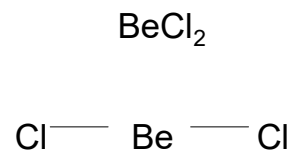
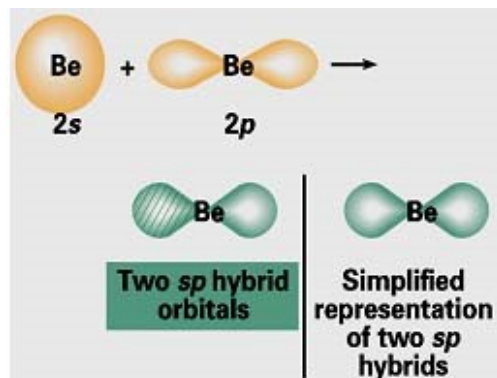
H



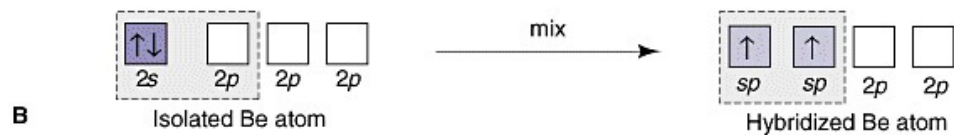
Molécula de BF_3 (xeometría trigonal planar)



Molécula de BeCl_2 (xeometría lineal)



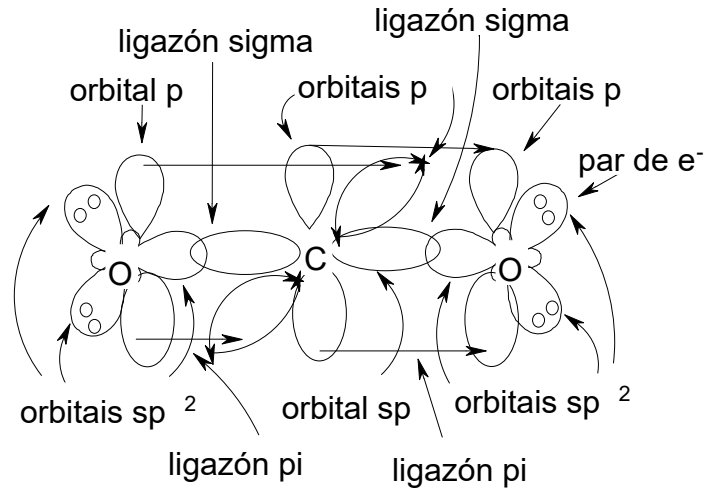
A



B



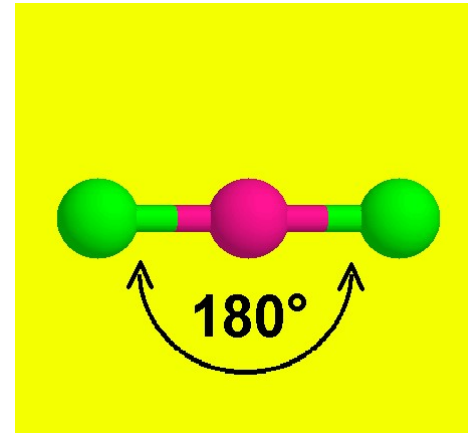
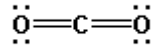
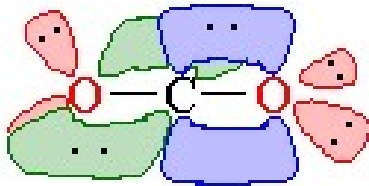
Molécula de dióxido de carbono (xeometría lineal)



Enlaces pi

Enlaces sigma

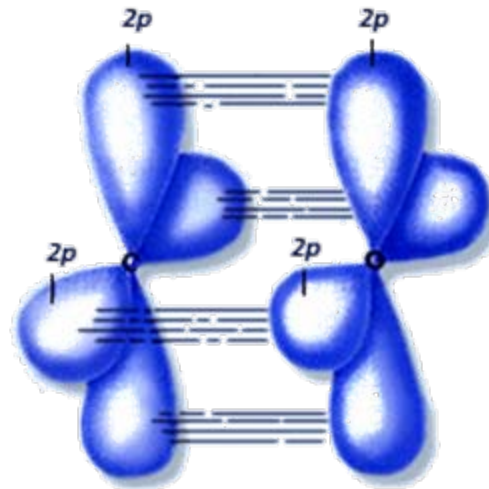
CO₂



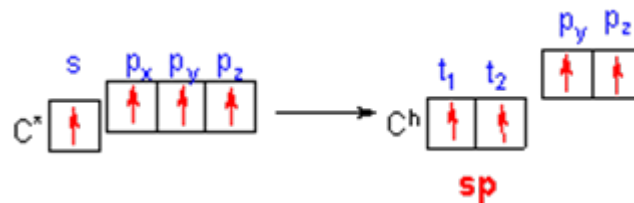
A molécula CO

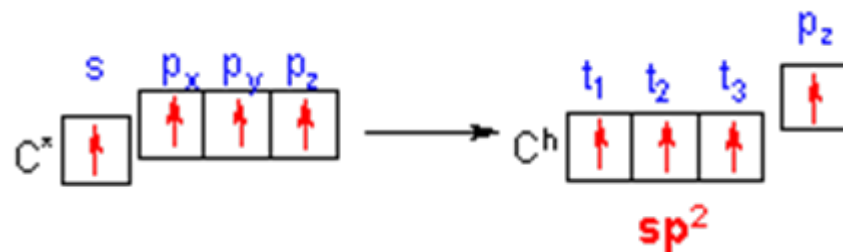
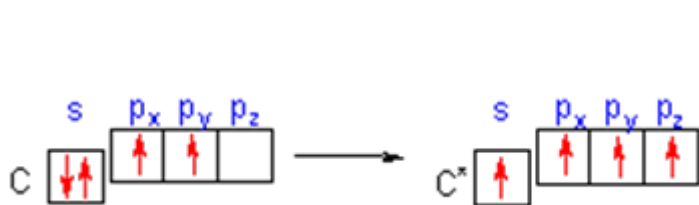
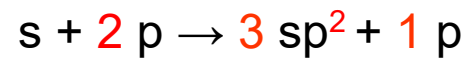
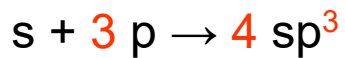
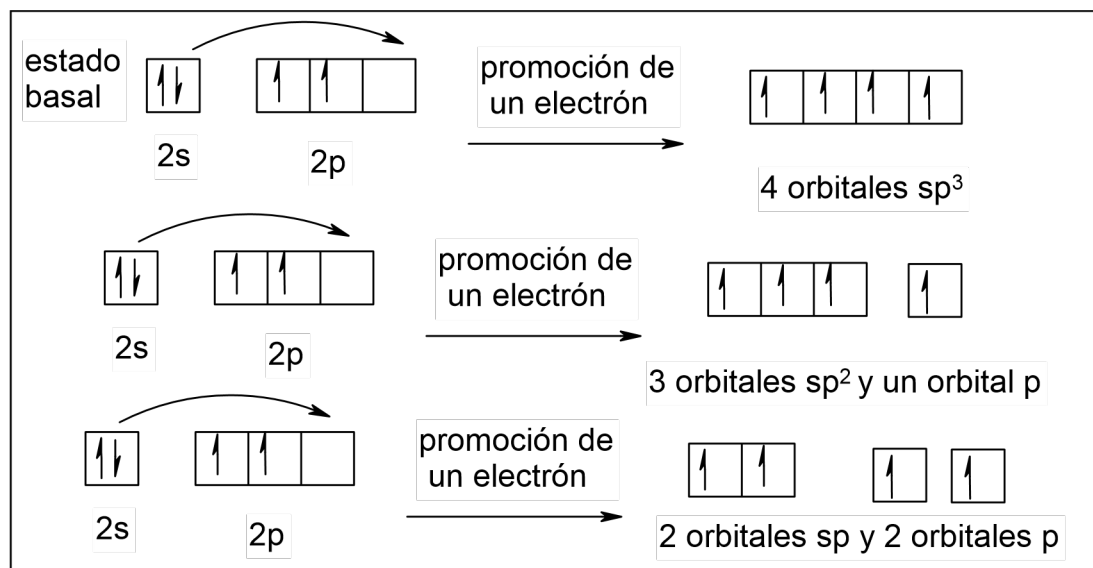
Contén 10 electróns de valencia que forman unha distribución electrónica de octetos: Un enlace tripla e un **par de electróns** senlleiros tanto en C coma en O. Isto require que ambos os átomos sufran unha hibridación sp.

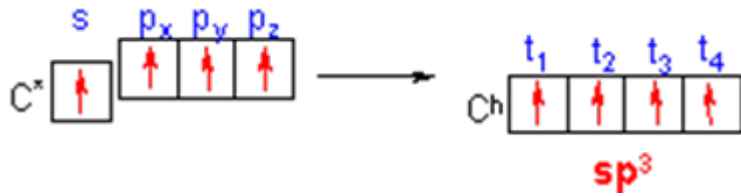
A ligazón tripla consiste daquela nun enlace sigma formado polos sp de ambos os átomos e dous enlaces pi produto do recubrimento dos orbitais 2p tanto en C coma en O . A molécula é forzosamente lineal.



Hibridacións do carbono, mostrando os electróns de valencia

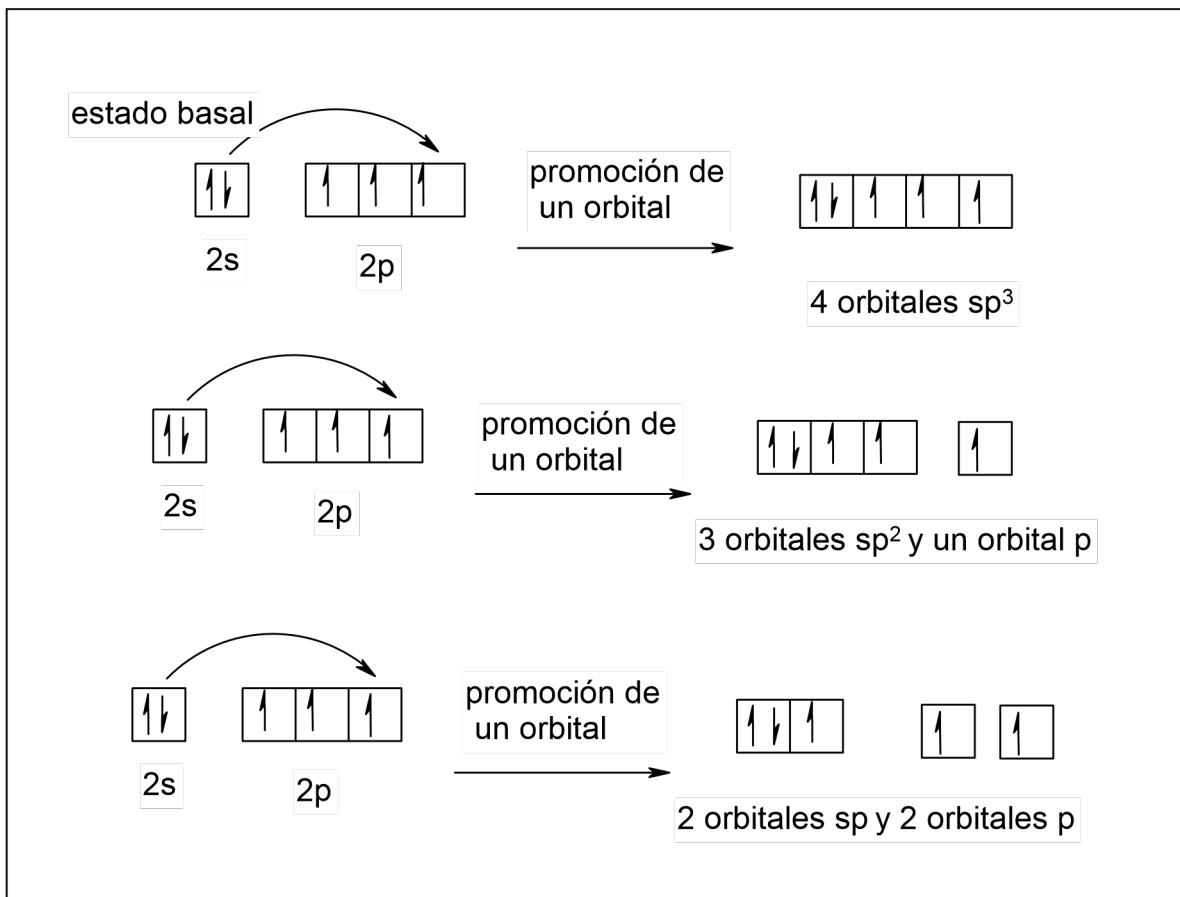


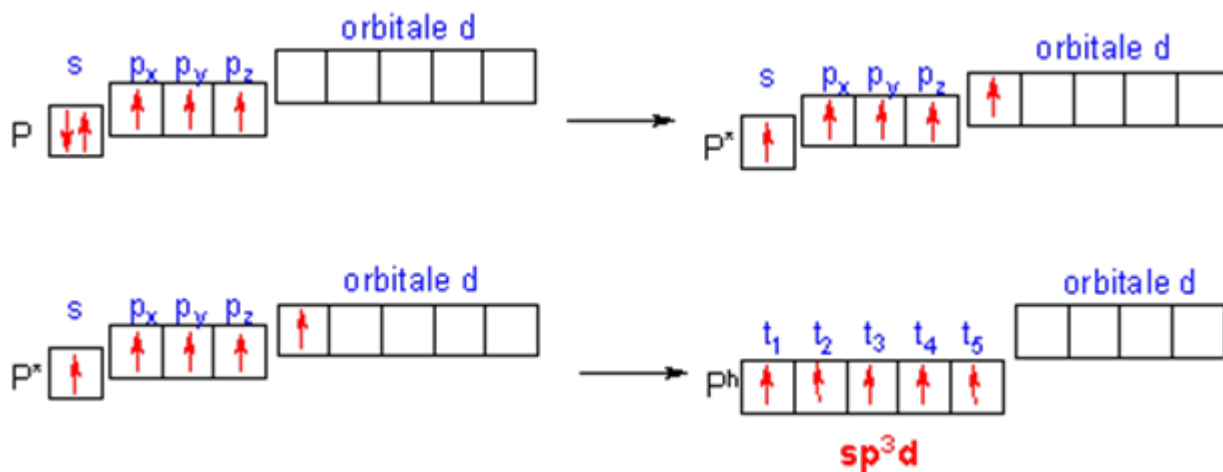




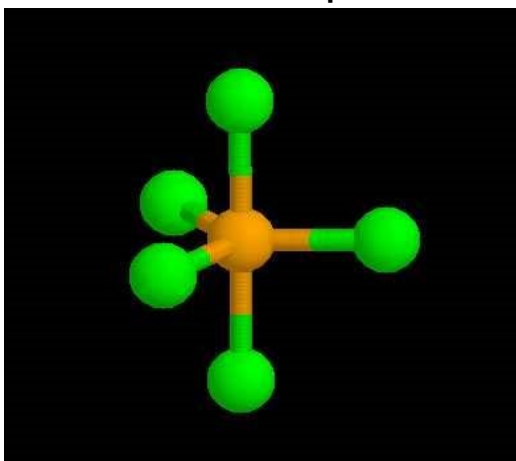
$s + p \rightarrow 2 sp + 2 p$ Hibridacións do nitróxeno,

mostrando os electróns de valencia

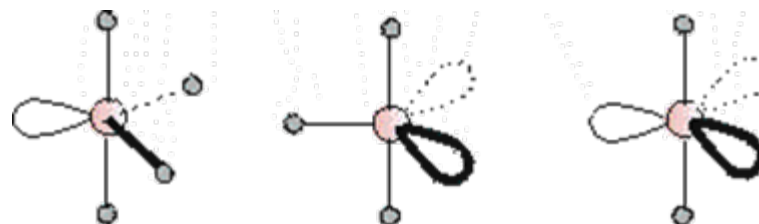




Xeometría = bipiramidal



Ejemplo: PCl_5



Hexafluoruro de azufre (SF_6); hibridación sp^3d^2 : 0

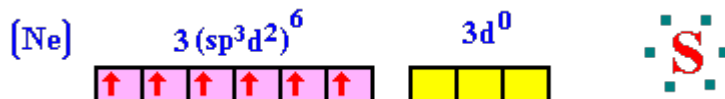
xofre ten de número atómico $Z = 16$ e a súa estrutura electrónica é:



ten dous electróns desapareados e pode formar dous enlaces. Así é a súa configuración cando actúa con valencia 2. Pero, ao ter os orbitales 3d unha enerxía similar á dos 3s e 3p, cun pouco máis de enerxía, desaparea todos os seus electróns adquirindo a configuración:



Os seis enlaces que pode formar son iguais, producíndose unha homoxeneización dun orbital s, tres p e dous d, é dicir, fórmanse seis orbitais híbridos sp^3d^2 :



A molécula de hexafluoruro de azufre ten unha estrutura espacial octoédrica.

