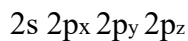


HIBRIDACIÓN

Para explicar la existencia de la estructura de los átomos y moléculas que corresponden a las geometrías predichas por la teoría VSEPR ha sido necesario desarrollar el concepto de hibridación, que dice que los átomos implicados en la formación de moléculas enlazadas covalentemente llevan a cabo cambios estructurales en sus orbitales atómicos de valencia. La teoría de la hibridación es una variación de la Teoría de orbitales moleculares.

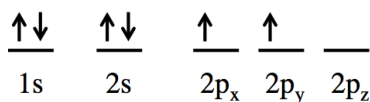
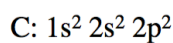
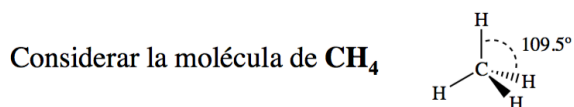
Por lo tanto “hibridación es el proceso de combinar dos o más orbitales atómicos para crear nuevos orbitales, llamados híbridos, que satisfacen las demandas geométricas del sistema”.

Por ejemplo, en el caso del metano, el carbono tiene 4 electrones de valencia (dos s y dos p), y se supone que para se forme enlace con los cuatro hidrógenos, el carbono debe estar en la configuración (excitada)



pero sabemos que los orbitales p están dirigidos a lo largo de los ejes cartesianos y por tanto forman un ángulo de 90° entre sí y sabemos que la configuración molecular debe ser tetraédrica, es decir con ángulos de 109.5° entre los enlaces C-H. Por tanto se dice que se combinan los orbitales s y los tres p del carbono para dar orbitales híbridos que están orientados 109.5° . Se dice que en este caso el carbono tiene hibridación sp^3 .

- Combinaciones lineales de orbitales “puros”



Se hibrida el orbital 2s con los tres orbitales 2p

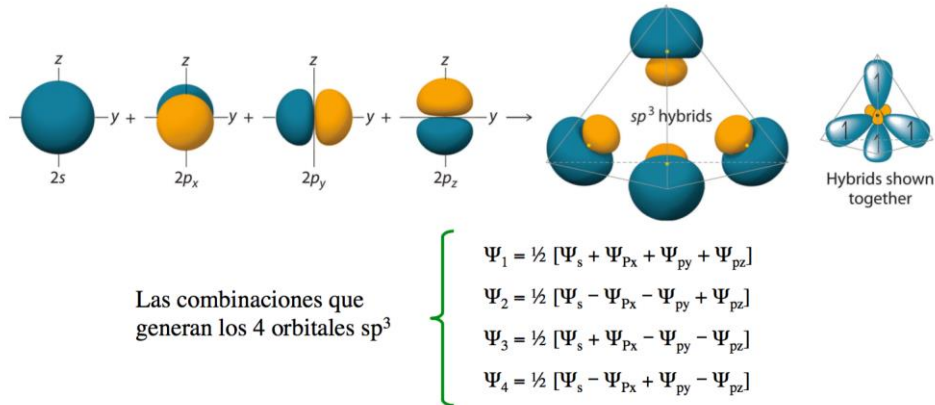


Se obtienen 4 orbitales moleculares híbridos de la combinación de un orbital 2s y tres orbitales 2p. Los OM tienen la forma matemática

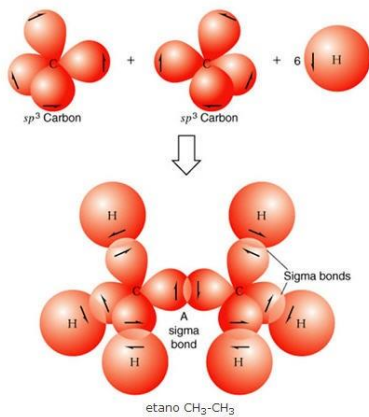
$$\Psi = a\Psi_{2s} + b\Psi_{2p_x} + c\Psi_{2p_y} + d\Psi_{2p_z}$$

Los coeficientes, positivos o negativos, se obtienen al resolver la ecuación de Shrodinger

En forma gráfica. Tendremos:



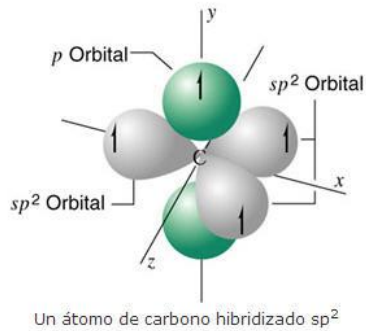
El carbono también presenta hibridación sp^3 en el etano:



Pero por ejemplo, en el caso del eteno o etileno, el carbono presenta una hibridación sp^2 , que resulta de la combinación del orbital $2s$ con solo dos orbitales $2p$ (el tercer orbital atómico $2p$ queda “puro”, es decir sin alterar).

Hibridación sp^2

En la hibridación trigonal se hibridan los orbitales $2s$, $2p_x$ y $2p_y$, resultando tres orbitales idénticos sp^2 y un electrón en un orbital puro $2p_z$.



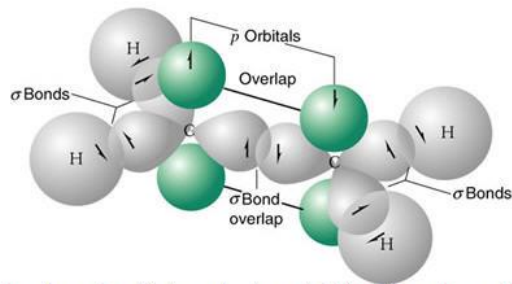
El carbono hibridado sp^2 da lugar a la serie de los alquenos.

La molécula de eteno o etileno presenta un doble enlace:

1. un enlace de tipo σ por solapamiento de los orbitales híbridos sp^2
2. un enlace de tipo π por solapamiento del orbital $2p_z$

El enlace π es más débil que el enlace σ lo cual explica la mayor reactividad de los alquenos, debido al grado de insaturación que presentan los dobles enlaces.

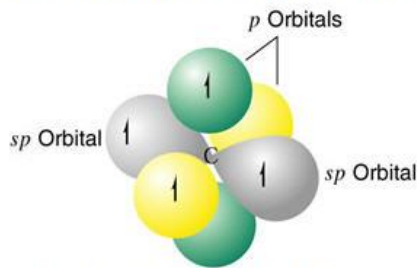
El doble enlace impide la libre rotación de la molécula.



Y el carbono también puede presentar hibridación sp , que resulta de la combinación del orbital atómico $2s$ y solo un orbital atómico $2p$ (los otros dos permanecen “puros”, es decir sin combinar)

Hibridación sp

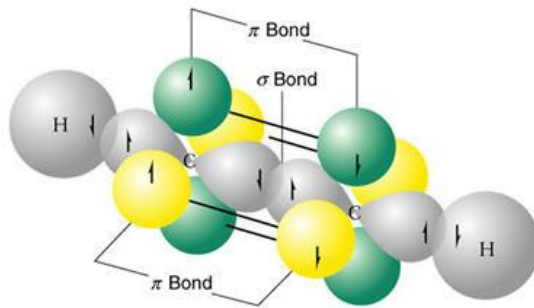
Los átomos que se hibridan ponen en juego un orbital s y uno p, para dar dos orbitales híbridos sp, colineales formando un ángulo de 180°. Los otros dos orbitales p no experimentan ningún tipo de perturbación en su configuración.



Un átomo de carbono hibridizado sp

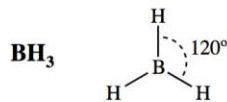
El ejemplo más sencillo de hibridación sp lo presenta el etino. La molécula de acetileno presenta un triple enlace:

- a. un enlace de tipo σ por solapamiento de los orbitales híbridos sp
- b. dos enlaces de tipo π por solapamiento de los orbitales 2p.

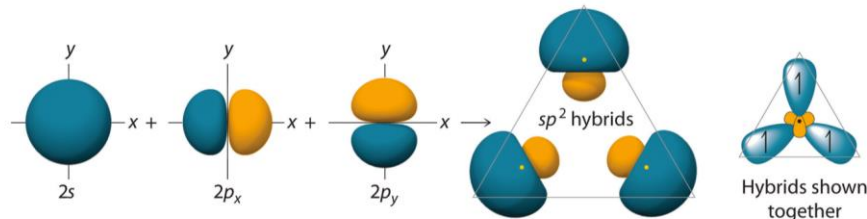


Formación de orbitales de enlaces moleculares del etino a partir de dos átomos de carbono hibridados sp y dos átomos de hidrógeno.

Por supuesto que el fenómeno de hibridación no solo es particular para el carbono, sino que sucede con muchos otros átomos. Ejemplo, hibridación sp^2 del B para formar la molécula BH_3 , que sabemos que tiene la geometría de plana triangular (o trigonal)



B: $1s^2 2s^2 2p^1$

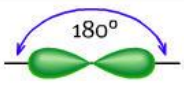
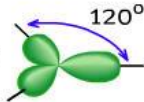
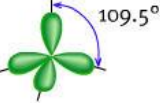
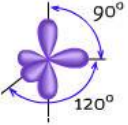


$$\Psi_1 = \sqrt{1/3} \Psi_s + \sqrt{2/3} \Psi_{p_x}$$

$$\Psi_2 = \sqrt{1/3} \Psi_s - \sqrt{1/6} \Psi_{p_x} + \sqrt{1/2} \Psi_{p_y}$$

$$\Psi_3 = \sqrt{1/3} \Psi_s - \sqrt{1/6} \Psi_{p_x} - \sqrt{1/2} \Psi_{p_y}$$

La siguiente tabla nos ilustra los diferentes tipos de hibridación que se pueden formar, la primera columna nos dice cuántos y de que tipo de orbitales atómicos participan, la tercera columna nos dice cuántos orbitales híbridos se forman y la cuarta columna el tipo de geometría a que dan lugar.

Pure atomic orbitals of central atom	Hybridization of the central atom	Number of hybrid orbitals	Shape of hybrid orbitals
s,p	sp	2	Linear 
s,p,p	sp ²	3	Trigonal Planar 
s,p,p,p	sp ³	4	Tetrahedral 
s,p,p,p,d	sp ³ d	5	Trigonal Bipyramidal 
s,p,p,p,d,d	sp ³ d ²	6	Octahedral 