

UNIDAD DIDÁCTICA 3  
EL ENLACE QUÍMICO  
PARTE 2: EL ENLACE COVALENTE

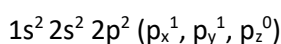
15.- TEORÍA DE LA HIBRIDACIÓN DE LOS ORBITALES ATÓMICOS

ESTUDIA / APRENDE

- La hibridación de orbitales  $sp^3$ .
- La explicación de la geometría de las moléculas de metano, etano, agua y amoníaco mediante la teoría de la hibridación.
- La hibridación de orbitales  $sp^2$ .
- La explicación de la geometría de las moléculas de eteno, formaldehído y las moléculas con el boro como átomo central mediante la teoría de la hibridación.
- La hibridación de orbitales  $sp$ .
- La explicación de la geometría de las moléculas de acetileno, cianuro de hidrógeno, dióxido de carbono y las moléculas con el berilio como átomo central mediante la teoría de la hibridación.

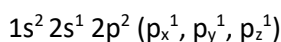
Para poder entender esta teoría la vamos a estudiar referida a un átomo de suma importancia en la química, el átomo de carbono:

Los seis electrones del átomo de carbono están repartidos entre los dos primeros niveles de energía de manera que su configuración electrónica es:



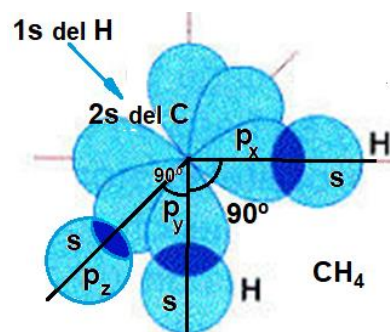
Según esta configuración, el carbono podría formar dos enlaces covalentes a partir de los dos electrones desapareados de su capa de valencia. Sin embargo excepto en el CO, el carbono actúa siempre con valencia covalente 4 (desaparean cuatro electrones).

Este desapareamiento se puede explicar diciendo que uno de los dos electrones del orbital 2s salta (promociona) al orbital  $p_z$  que estaba vacío (estado excitado), con lo que la distribución de los electrones quedaría:



Habría cuatro electrones desapareados dispuestos a realizar cuatro enlaces covalentes: uno con un orbital de tipo s y tres con orbitales de tipo p.

Si los enlaces covalentes mencionados se realizaran con cuatro átomos de hidrógeno formarían una molécula de metano  $CH_4$ , en la cual habría tres enlaces iguales entre los orbitales 1s del hidrógeno y los 2p del carbono formando ángulos de  $90^\circ$  entre ellos y un enlace diferente, el formado por el electrón de uno de los átomos de hidrógeno (orbital 1s) con el electrón desapareado del orbital 2s del carbono como indica la figura.



## • HIBRIDACIÓN $sp^3$

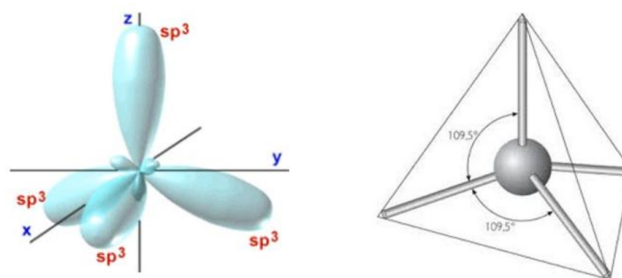
### MOLÉCULA DE METANO

Sin embargo, cuando el carbono enlaza con cuatro hidrógenos para formar el metano, o sea, cuando forma cuatro enlaces sencillos (ninguno doble ni triple), se ha llegado a averiguar que los cuatro enlaces carbono-hidrógeno son iguales y que los ángulos que forman en la molécula los cuatro enlaces son iguales, de  $109,5^\circ$  (ninguno de  $90^\circ$  como indica la teoría), como si los cuatro orbitales con sus cuatro electrones desapareados fueran idénticos; es decir, no pueden ser un orbital de tipo "s" y tres de tipo "p" los que enlazan, puesto que formarían enlaces diferentes, sino que tienen que ser cuatro orbitales iguales.

La explicación teórica que se le ha dado a este hecho es la siguiente: antes de realizar cuatro enlaces sencillos, el átomo de carbono prepara sus cuatro electrones ya desapareados, reorganiza sus orbitales, de manera que estos cuatro electrones, que se movían con diferente energía en un orbital 2s y en tres orbitales 2p, igualan su energía, lo que consigue disminuyendo la de los tres electrones 2p, y aumentándola el electrón 2s (la energía total sigue siendo la misma; la que pierden los 2p es la que gana el 2s).

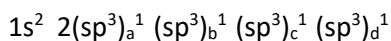
**Esto hace que los cuatro electrones ya no se muevan por los orbitales 2s o 2p puesto que éstos se caracterizaban por un valor de energía que ya no poseen los electrones desapareados, sino que se moverá por cuatro nuevos orbitales que se caracterizan por poseer la misma energía cuyo valor está entre la del 2s y la de los 2p.**

Se forman así cuatro orbitales exactamente iguales, mezcla o "hibridación" de los cuatro preexistentes, y que se llaman, debido a su procedencia (1 orbital s y 3 orbitales p), **orbitales híbridos  $sp^3$** : con el centro lógicamente en el núcleo del átomo, los cuatro orbitales, están dirigidos hacia los vértices de un hipotético tetraedro regular tal y como muestra la figura: **ES UNA FIGURA TETRAÉDRICA**

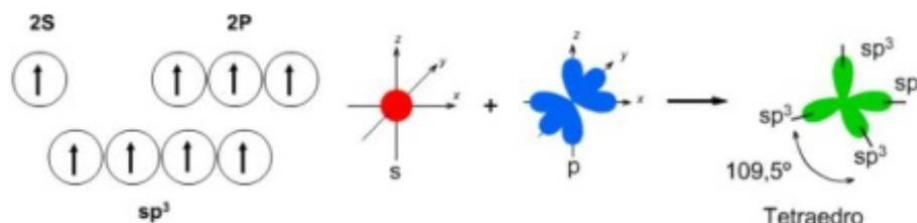


En resumen: la hibridación  $sp^3$  es propia de los átomos de C con cuatro enlaces simples. Se forman por combinación de *un orbital s* y *tres orbitales p*, resultando cuatro orbitales híbridos  $sp^3$  iguales entre sí, dispuestos tetraédricamente formando entre ellos ángulos de  $109,5^\circ$ . Tienen dos lóbulos, uno mayor, que es el que se usa para formar el enlace, y otro muy pequeño, (aunque a éste no le daremos mayor importancia e incluso no aparece en la mayoría de representaciones).

La nueva configuración electrónica sería:



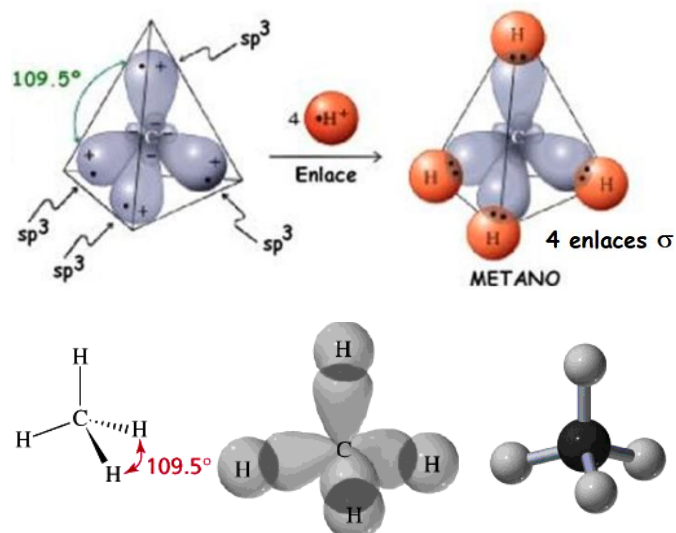
A continuación podemos ver un esquema que nos indica los pasos seguidos para producirse la hibridación  $sp^3$ :



La hibridación supone pues la igualación energética entre los orbitales que intervienen en la misma y, por tanto, la disposición espacial idéntica para los mismos.

Este hecho es el que le da a los enlaces sencillos de los átomos de carbono la propiedad de poder ser todos iguales y la de que las moléculas orgánicas tengan una distribución de los átomos tridimensional con una gran estabilidad.

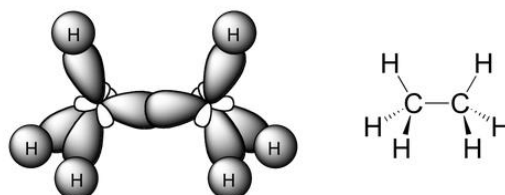
Una vez hecha la representación tridimensional de la hibridación  $sp^3$  podemos observar en la siguiente figura la posterior formación de la molécula de metano con la formación de cuatro orbitales moleculares tipo  $\sigma$ :



El átomo de carbono puede formar enlaces covalentes sencillos con otros átomos de carbono y también con átomos de hidrógeno, de oxígeno, de nitrógeno, de azufre y del resto de no metales.

### MOLÉCULA DE ETANO

En la figura tenemos la molécula de etano, donde distinguimos un enlace sencillo C-C y seis enlaces C-H. En ambos átomos de carbono se ha producido la hibridación  $sp^3$ .

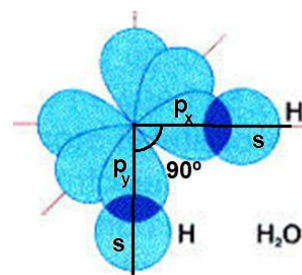


### MOLÉCULAS DE AGUA Y AMONIACO

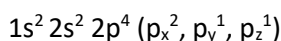
Esta misma explicación sirve para comprender la geometría de las moléculas de agua y de amoniaco:

Por lógica la molécula de agua, si observamos la configuración electrónica del átomo de oxígeno, tendría que tener un ángulo de enlace de  $90^\circ$  tal y como queda representado en la figura por los enlaces entre el orbital 1s del hidrógeno y los orbitales 2p semillenos del agua.

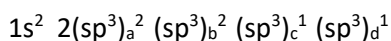
Sin embargo experimentalmente se ha calculado que el valor real es de  $104,5^\circ$ , próximo al valor del tetraedro regular antes citado. La explicación es que, antes de la formación del enlace covalente entre los átomos de hidrógeno y el de oxígeno, en éste se produce una hibridación  $sp^3$ , que en el caso del oxígeno deja dos orbitales con electrones desapareados y dos orbitales completos; son, evidentemente, los incompletos los que participan en la formación de los enlaces covalentes desapareados siendo el ángulo entre ellos de  $104,5^\circ$ .



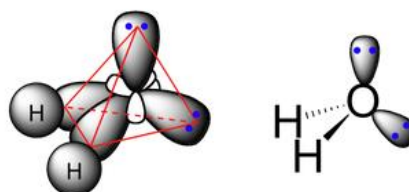
#### CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA DEL OXÍGENO:



#### HIBRIDACIÓN:



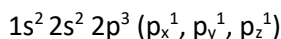
Se producen dos enlaces covalentes con formación de dos orbitales moleculares tipo  $\sigma$ .



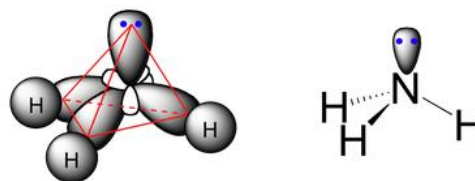
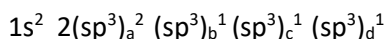
Quedaría así explicada la **GEOMETRÍA ANGULAR** y el ángulo de la molécula de agua.

En la molécula de amoníaco ocurre exactamente lo mismo: en el nitrógeno se produce una hibridación  $sp^3$ , que permite explicar la geometría de la molécula (**PIRAMIDAL**):

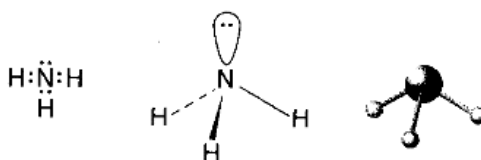
### CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA DEL NITRÓGENO:



### HIBRIDACIÓN:

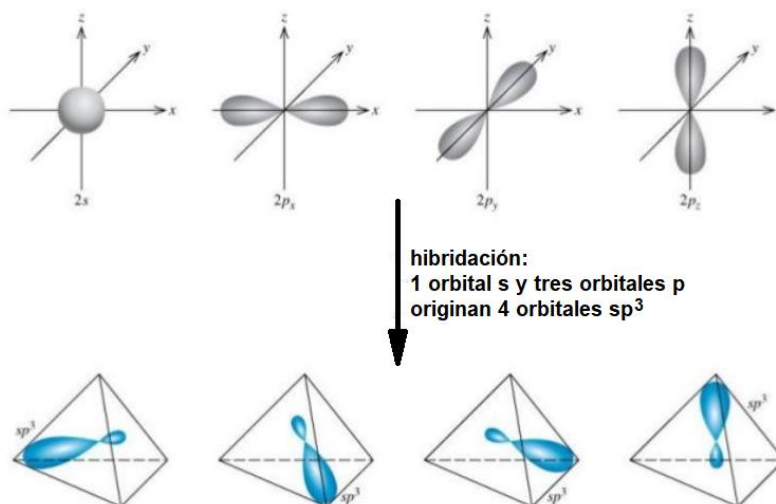


Se producen tres enlaces covalentes con formación de tres orbitales moleculares tipo  $\sigma$ .



## RESUMEN HIBRIDACIÓN $sp^3$

### Formación de orbitales híbridos $sp^3$



## ACTIVIDADES RESUELTAS:

### ¿Pueden combinarse tres orbitales p para dar tres orbitales híbridos?

No, ya que los tres orbitales son equivalentes y de igual forma y no tiene sentido aplicarles la hibridación.

### Describe la molécula de tetracloruro de carbono ( $CCl_4$ ) bajo la teoría de hibridación de orbitales.

El átomo de carbono dispone, en su capa de valencia, de un orbital  $2s$  completo dos orbitales  $2p$  semillenos y un orbital  $sp$  vacío. La combinación de estos cuatro orbitales atómicos (un  $2s$  y tres  $2p$ ) origina cuatro orbitales híbridos  $sp^3$ , los cuales se distribuyen a lo largo de los vértices de un tetraedro. Estos cuatro orbitales quedan cada uno con un electrón desapareado.

El átomo de cloro dispone de un orbital  $3p$  semilleno.

Luego los cuatro enlaces se originan por solapamiento frontal de los orbitales  $3p$  del cloro y los orbitales  $sp^3$  del C, lo que origina cuatro enlaces de tipo  $\sigma$ . La molécula será pues tetraédrica, tal y como también vimos en la molécula de metano.

## • HIBRIDACIÓN $sp^2$

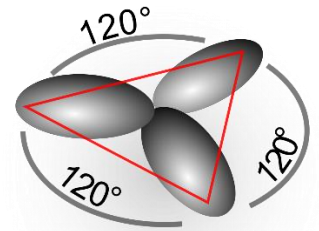
La hibridación  $sp^2$  se da, como su propio nombre indica, entre un orbital  $s$  y dos orbitales  $p$  para formarse tres orbitales iguales (híbridos).

Al igual que hicimos con la hibridación  $sp^3$ , la vamos a estudiar referida al átomo de carbono y a continuación la ampliamos a algún otro caso de importancia para este curso.

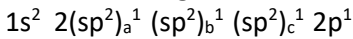
El átomo de carbono puede formar enlaces covalentes dobles, es decir compartir con otro átomo dos pares de electrones; e incluso triples compartiendo tres pares de electrones (tres electrones desapareados de cada átomo). Estos dos casos no pueden ser explicados mediante la hibridación del orbital  $2s$  y los tres orbitales  $2p$  (las direcciones de los orbitales impiden solapar dos o tres orbitales con el mismo átomo), pero sí mediante otros dos tipos de hibridaciones que proporcionan una geometría especial a los átomos de carbono que tienen estos tipos de enlace.

En el átomo de Carbono, la **hibridación  $sp^2$  se produce cuando éste presenta dos enlaces simples y uno doble**. Los átomos que se encuentran en estas condiciones poseen tres orbitales híbridos,  $sp^2$ , iguales, y un orbital  $p$  que se reserva sin hibridar.

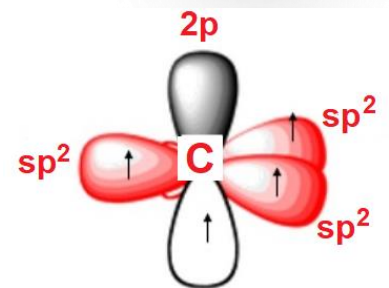
**Los orbitales híbridos  $sp^2$  están formados por combinación de un orbital  $s$  y dos orbitales  $p$** . Están dispuestos en el **mismo plano** formando ángulos de  $120^\circ$ . Podemos considerar que cada orbital  $sp^2$  está formado por un solo lóbulo, parecido a los  $sp^3$ , pero más globular por la mayor proporción de orbitales  $s$  respecto de los  $p$ .



La nueva configuración del carbono, tras la hibridación  $sp^2$  queda:



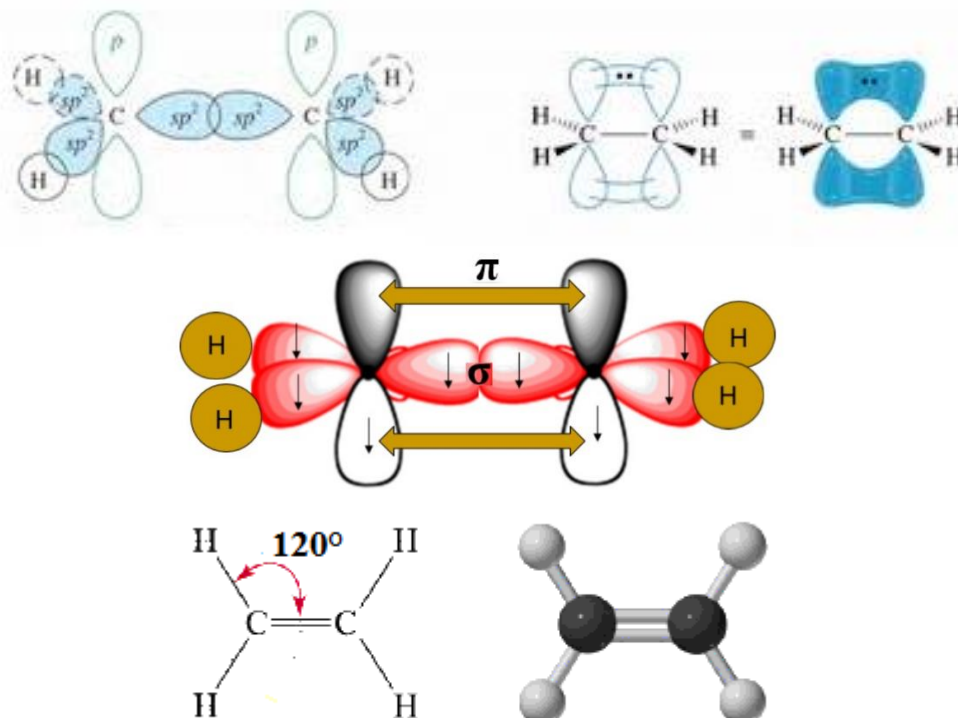
Los enlaces dobles pueden ser con otro átomo de carbono, dentro de la cadena de átomos de carbono de las moléculas orgánicas, o con el oxígeno, el nitrógeno, el azufre...



### MOLÉCULA DE ETENO (ETILENO)

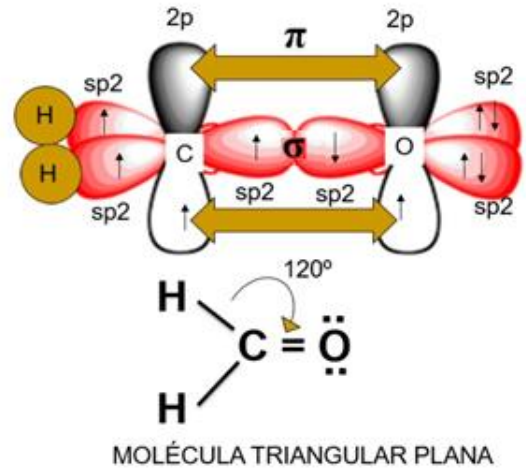
A continuación vamos a ver la representación de la molécula de eteno ( $CH_2=CH_2$ ). Para formarse el doble enlace entre dos átomos de carbono se solapan entre sí dos orbitales  $sp^2$ , generándose así un orbital molecular de tipo  $\sigma$ ; el otro orbital molecular (de tipo  $\pi$ ) se produce por solapamiento de los dos orbitales  $p$ .

El carbono forma ángulos de  $120^\circ$  con los hidrógenos y con el otro carbono al que está enlazado. Es una molécula plana:



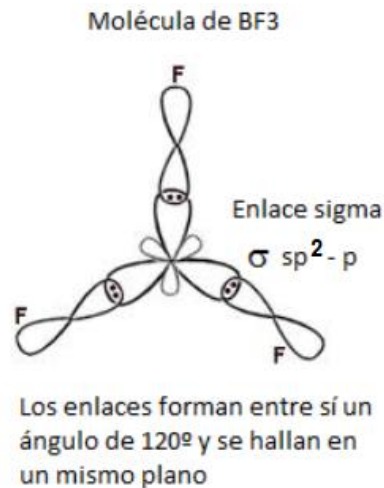
## MOLÉCULA DE FORMALDEHIDO (HCHO)

Tanto en el carbono como en el oxígeno se produce la hibridación  $sp^2$  que permite realizar el doble enlace entre ambos con la formación de un enlace  $\sigma$  (solapamiento de dos orbitales  $sp^2$ ) y un enlace  $\pi$  (solapamiento de los dos orbitales p que no han intervenido en la hibridación). En la figura siguiente podemos ver la representación de la molécula. El carbono forma ángulos de  $120^\circ$  con los dos hidrógenos y con el oxígeno.



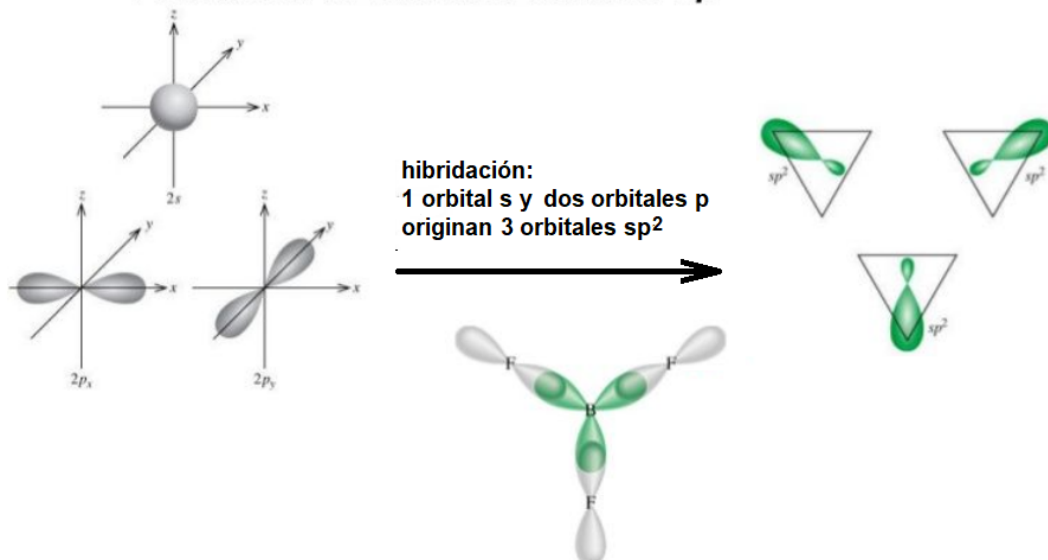
## MOLÉCULAS CON EL BORO COMO ÁTOMO CENTRAL

Esta misma explicación sirve para comprender la geometría de las moléculas en las que interviene el Boro cuando todos sus enlaces son simples (valencia covalente 3, luego 3 enlaces covalentes posibles). Esto hace que todas las moléculas cuyo átomo central sea el **BORO** sean planas y de **FORMA TRIÁNGULAR** con ángulos de  $120^\circ$ .



## RESUMEN HIBRIDACIÓN $sp^2$

### Formación de orbitales híbridos $sp^2$



## • HIBRIDACIÓN $sp$

La hibridación  $sp$  se da entre un orbital  $s$  y un orbital  $p$  para formarse dos orbitales iguales (híbridos).

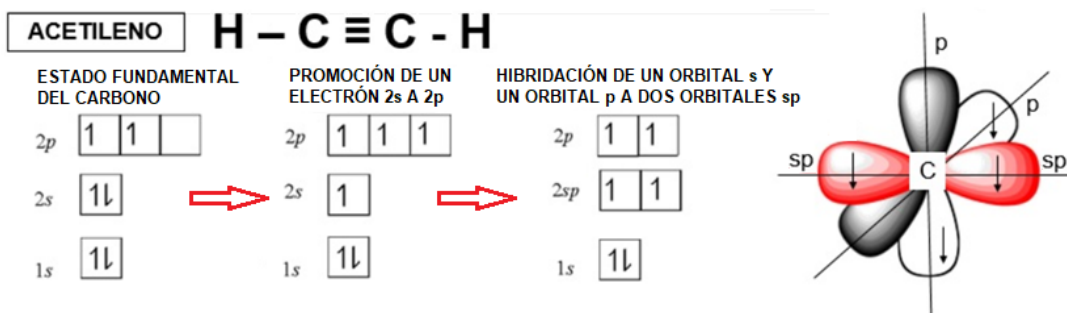
La vamos a estudiar referida al átomo de carbono ya que es el principal elemento que la presenta.

Se da en los átomos de  $C$  que presentan un enlace simple y uno triple, o bien dos enlaces dobles (como es el caso de la molécula de  $CO_2$ ). Poseen dos orbitales híbridos  $sp$  iguales y dos orbitales  $p$  que se reservan sin hibridar.

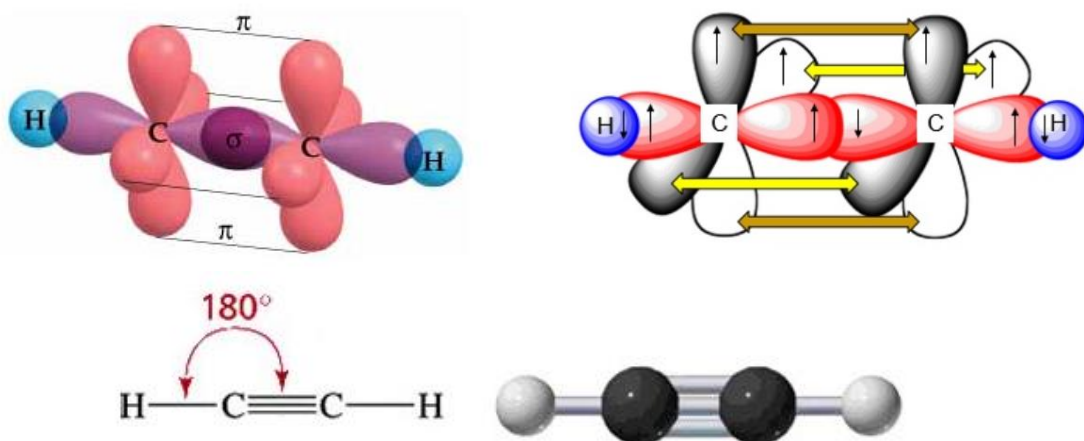
En el caso del triple enlace se forma a partir de uno de los orbitales híbridos  $sp$  (que formará un enlace tipo  $s$ ) y de ambos orbitales  $p$  (que formarán enlaces tipo  $p$ ). Ambos orbitales híbridos son lobulados pero más globulares que los  $sp^2$ , pues la proporción de  $s$  y  $p$  en esta hibridación es del 50%. Se disponen formando un ángulo de  $180^\circ$ .

### MOLÉCULA DE ACETILENO

En la figura podemos observar los pasos en el átomo de carbono hasta producirse la hibridación  $sp$ . Los dos orbitales híbridos  $sp$  están representados en rojo, forman entre ellos un ángulo de  $180^\circ$ . Los orbitales  $2p$  se encuentran formando ángulos de  $90^\circ$  con ellos.

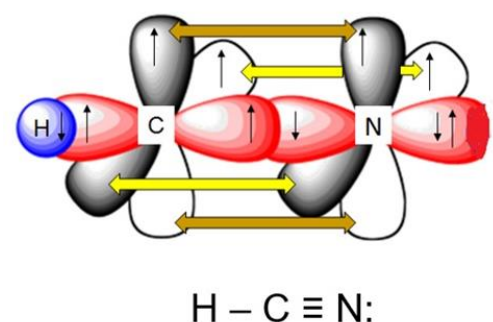


Una vez producida la hibridación se forman los tres enlaces entre dos átomos de carbono por solapamiento de dos orbitales híbridos  $sp$  (enlace  $\sigma$ ) más dos solapamientos de orbitales  $p$  (enlaces  $\pi$ ) como muestran las figuras. Con cada hidrógeno se forma un enlace  $\sigma$  entre el orbital  $1s$  del hidrógeno y el otro orbital híbrido  $sp$  de cada carbono. La molécula es lineal.



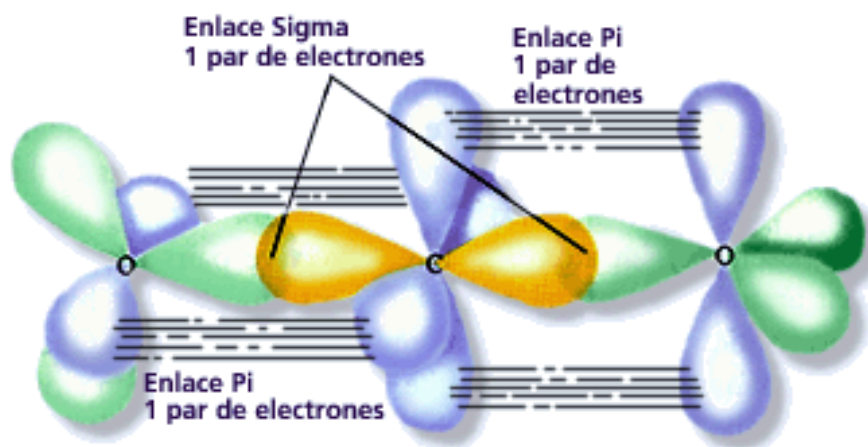
### MOLÉCULA DE HCN

Se produce una hibridación  $sp$  tanto en el carbono como en el nitrógeno. El nitrógeno actúa con valencia covalente tres, por lo que en este caso compartiría sus tres electrones desapareados con un solo átomo de carbono (un enlace  $\sigma$  y dos  $\pi$ ), mientras que al átomo de carbono le queda un electrón desapareado en uno de los orbitales híbridos  $sp$  que comparte con un hidrógeno (enlace  $\sigma$ ). Se forma una molécula lineal como nos muestra la figura:

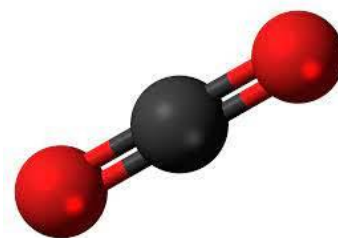


RECUERDA: Si la línea que une los núcleos de los átomos es una zona de gran densidad electrónica decimos que el orbital molecular formado es un **orbital  $\sigma$**  y se produce por interacción frontal de orbitales, mientras que si en esta línea no existe probabilidad de encontrar a los electrones del orbital molecular decimos que es un **orbital  $\pi$** , que se produce cuando los orbitales  $p$  se interpenetran lateralmente.

## MOLÉCULA DE DIÓXIDO DE CARBONO

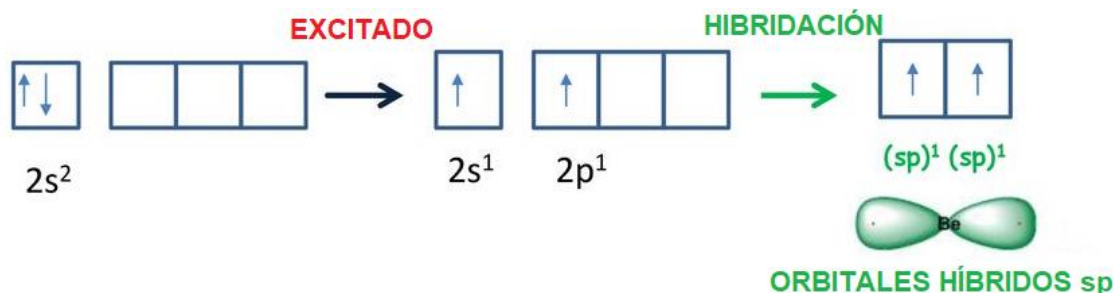


En la figura que tienes arriba puedes observar cómo se forma la molécula de dióxido de carbono. En el átomo de carbono se produce una hibridación  $sp$ : esta hibridación permitirá al átomo de carbono realizar dos enlaces dobles. En los átomos de oxígeno se produce una hibridación  $sp^2$  que también les permitirá realizar un enlace doble a cada uno. El enlace doble entre el carbono y uno de los oxígenos se produce del siguiente modo: uno de los enlaces se produce entre un orbital híbrido  $sp$  del carbono y un orbital híbrido  $sp^2$  del oxígeno (enlace tipo  $\sigma$ ). El otro enlace se produce entre uno de los orbitales  $p$  no híbridos del carbono y el orbital  $p$  no híbrido del oxígeno (enlace tipo  $\pi$ ). Si te fijas para que los dos enlaces dobles se puedan realizar, los dos oxígenos disponen sus orbitales  $p$  no híbridos perpendiculares entre ellos (en la figura, en el oxígeno de la izquierda esta horizontal y en el de la derecha vertical). La molécula de dióxido de carbono es, por tanto una molécula lineal.



## MOLÉCULAS CON EL BERILIO COMO ÁTOMO CENTRAL

En la figura de abajo puedes observar cómo se forma la molécula de cloruro de berilio. En el átomo de berilio se produce una promoción de un electrón  $2s$  a un orbital  $2p$  vacío y a continuación una hibridación  $sp$ . Los enlaces con el cloro son de tipo  $\sigma$ . Las moléculas donde el berilio actúa como átomo central son lineales.

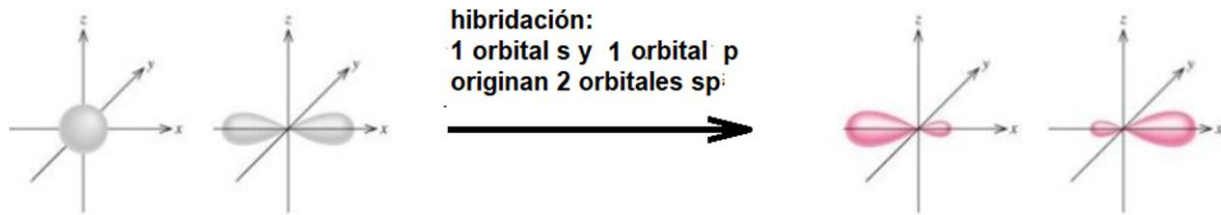


MOLÉCULA DE CLORURO DE BERILIO

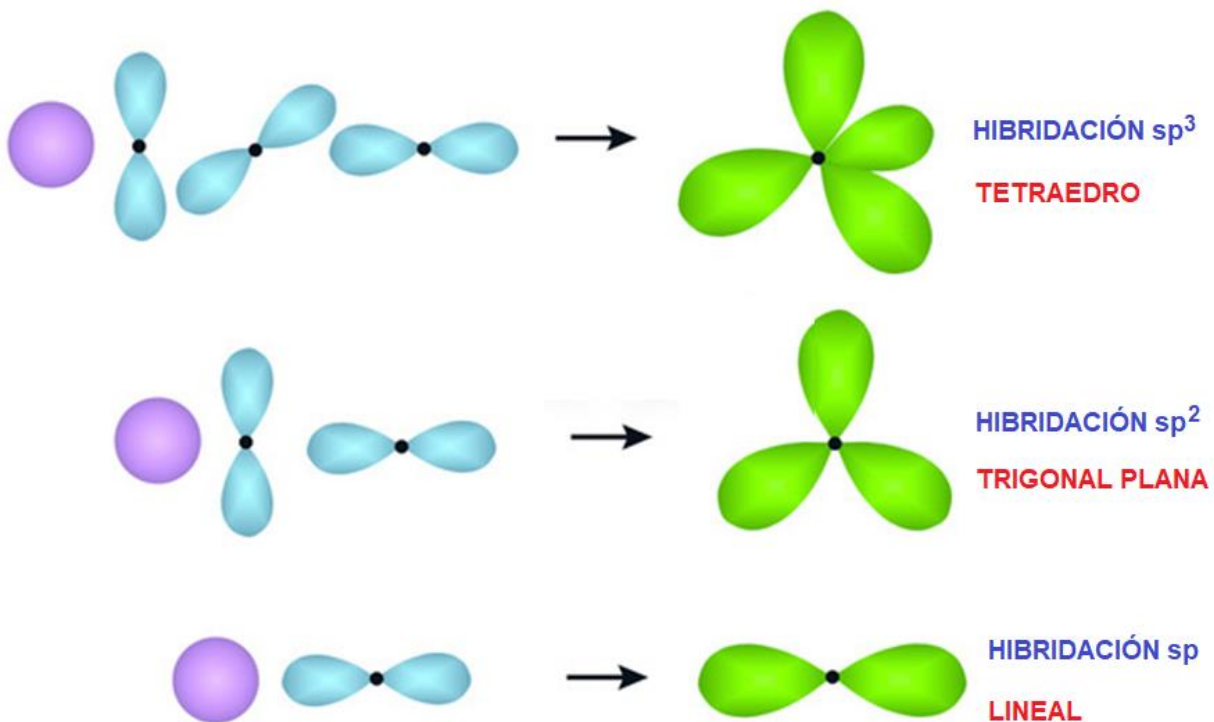


## RESUMEN HIBRIDACIÓN $sp$

### Formación de orbitales híbridos $sp$



## RESUMEN HIBRIDACIÓN



## CONTESTA Y REPASA

- ¿Qué geometrías son posibles para compuestos cuyos enlaces (del átomo central) pueden describirse utilizando orbitales híbridos  $sp^3$ ?
- Dibuja la molécula de diclorometano de forma tridimensional tal y como la explica la teoría de hibridación y escribe el valor de los ángulos de enlace. ¿A qué es debida la geometría de esta molécula?
- Describe la molécula de fosfano bajo la teoría de hibridación de orbitales.
- Explica la geometría de las moléculas de hidruro de berilio y de borano según la teoría de hibridación de orbitales.
- Indica el tipo de hibridación que presenta cada uno de los átomos de carbono en la molécula  $CH_3 - C \equiv C - CH_3$