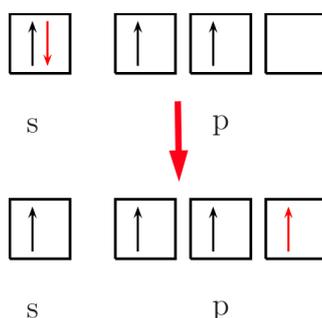


Hibridación de orbitales

La valencia con que el carbono actúa en los hidrocarburos tiene el valor cuatro. Si tomamos en consideración la configuración de la capa de valencia del carbono, veremos que es $2s^2 2p^2$, encontrándose desapareados solamente dos de los cuatro electrones. Para justificar la valencia 4 del carbono, suponemos que se produce la promoción de un electrón desde el orbital $2s$ a un orbital p vacío, quedando así los cuatro electrones desapareados, tal y como indica la siguiente representación.



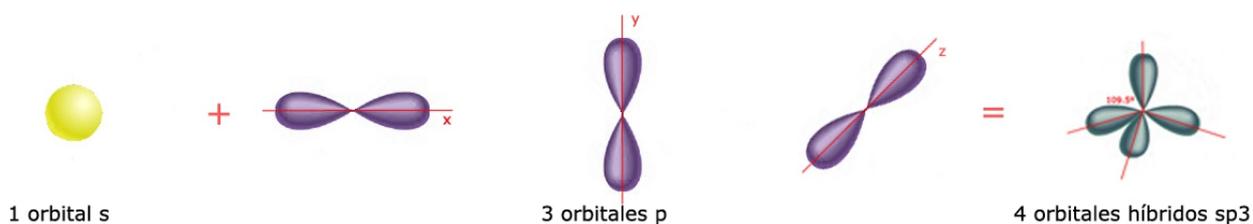
La valencia 4 del carbono quedaría así explicada, pero, en el caso de la molécula de metano, no sucede lo mismo con su estructura geométrica. Si los cuatro enlaces C-H se produjeran mediante solapamiento de los tres orbitales p y el s del carbono con cuatro orbitales s del hidrógeno, dichos enlaces no serían equivalentes. Del análisis de la geometría de la molécula se deduce que los cuatro enlaces C-H forman, cada uno con los otros tres, un ángulo de $109,5^\circ$, lo cual corresponde a una forma tetraédrica de la molécula y, a la vez, supone una equivalencia entre todos los enlaces formados.

Para solucionar la discrepancia entre la equivalencia o no de los enlaces, Pauling propuso la teoría de la hibridación de orbitales, basada en la combinación de las funciones de onda correspondientes a cada uno de los orbitales que intervienen en la hibridación. Se obtendrán, de esta forma, tantos orbitales híbridos como orbitales puros intervienen en el proceso.

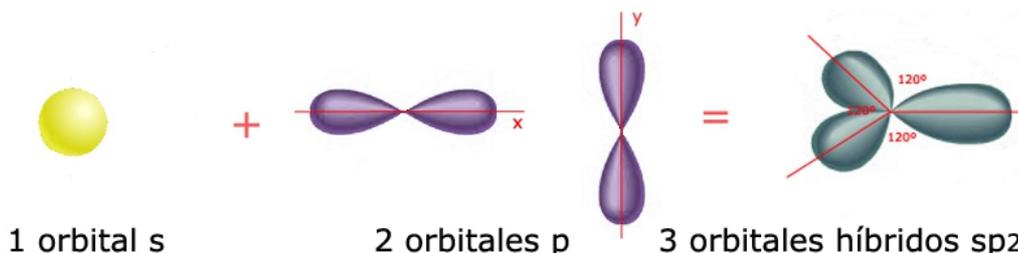
Veamos a continuación algunos ejemplos de geometría de moléculas y su correspondiente justificación mediante la teoría de la hibridación.

a) Molécula de metano: Para el metano, tal y como se ha indicado anteriormente, la forma de la molécula es tetraédrica, con cuatro enlaces equivalentes. Para justificar esta estructura, se supone la combinación de las funciones del orbital s y de los tres orbitales p del átomo de carbono, obteniéndose un total de cuatro

orbitales híbridos sp^3 . Para que la fuerza de repulsión entre los electrones sea mínima, estos orbitales se disponen de forma tetraédrica, tal y como indica el siguiente conjunto de imágenes:

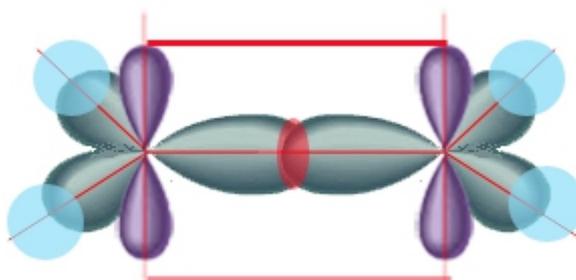


b) Molécula de eteno: El análisis de la estructura de este compuesto indica que tiene una forma plana, con ángulos entre enlaces de 120° . Para explicar este hecho, utilizamos para el carbono una hibridación sp^2 , donde la combinación de un orbital s y dos orbitales p da lugar a la formación de tres híbridos sp^2 , como puede verse a continuación:



Cada átomo de carbono se une a un carbono y dos hidrógenos utilizando estos tres orbitales híbridos. Como vemos, queda sin hibridación un orbital p para cada átomo de carbono, lo que da lugar a la formación de un enlace entre los dos átomos de carbono por solapamiento de dichos orbitales.

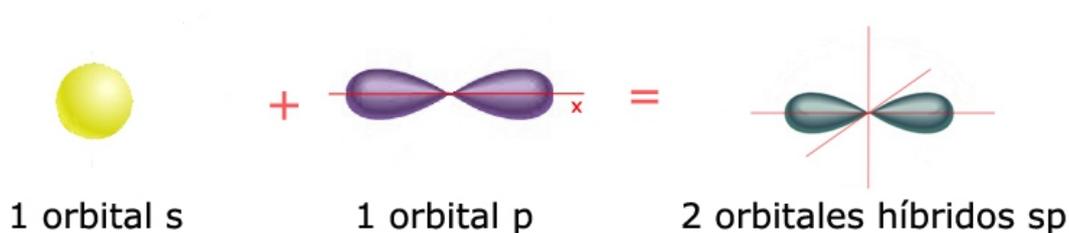
Este solapamiento es menos intenso que el solapamiento $sp^2 - sp^2$, lo que explica la menor fuerza del enlace formado entre orbitales p.



En la imagen anterior pueden verse los solapamientos entre los orbitales s del H (en color cian) y los híbridos sp^2 del C, así como el solapamiento entre los

orbitales híbridos sp^2 de cada uno de los átomos de carbono, representado por la elipse de color rojo. El enlace entre los dos orbitales p se representa mediante dos líneas paralelas de color rojo.

c) Molécula de etino (acetileno): La molécula de este compuesto es lineal, existiendo un triple enlace entre los dos átomos de carbono. Para explicar esta estructura, suponemos una hibridación de tipo sp (un orbital s y uno p del átomo de carbono). El resultado será dos híbridos sp , que forman entre sí un ángulo de 180° , quedando para cada átomo de carbono dos electrones desapareados, cada uno de ellos ocupando un orbital p.



El triple enlace se formará por el solapamiento de un orbital sp de cada átomo de carbono, y el solapamiento de los dos orbitales p sin hibridar de cada uno de ellos.

