

## Hibridación y Momento Dipolar

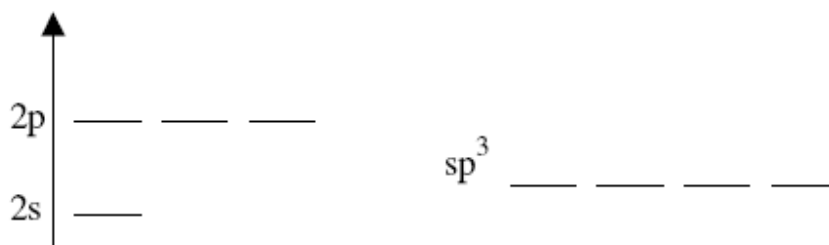
### Conceptos Previos

- El *orbital o capa de valencia* es el orbital asociado al más alto nivel cuántico que contiene electrones.
- La forma de como se ordenan los electrones de valencia en una molécula queda determinada por las estructuras de Lewis, y la geometría molecular puede ser predecida por VSEPR (*Valence Shell Electron Pair Repulsion*) o teoría de repulsión de pares. Es decir, los pares de electrones libres afectan a la geometría del átomo que estamos estudiando.
- La Hibridación es una modificación del modelo de electrón localizado el cual indica que los átomos usan ciertos *orbitales especiales* cuando forman moléculas, éstos *orbitales especiales* se consiguen combinando orbitales nativos de los elementos.
- La *Teoría de Orbitales Moleculares*, sólo es aplicable a moléculas diatómicas.

### **Hibridación $sp^3$**

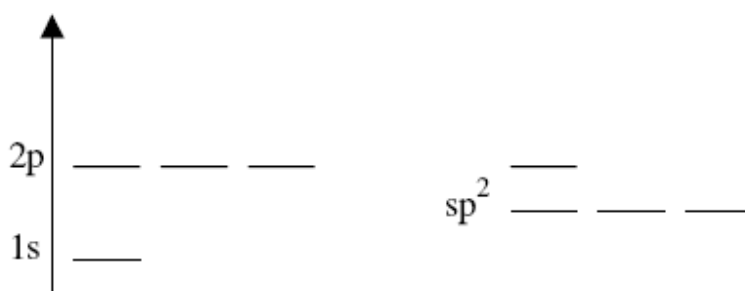
En el metano ( $CH_4$ ), el Carbono (átomo central) se enlaza con 4 Hidrógenos. En general asumimos que en los fenómenos de enlace sólo intervienen los electrones de valencia. Esto implica que los Hidrógenos del metano usan orbitales  $1s$ . El Carbono posee orbitales  $2s$  y  $2p$  (ortogonales) en su capa de valencia, por lo que con esto la molécula de metano debería presentarse de dos formas:

1. Existen dos tipos de enlaces C-H, uno con orbitales  $2p-1s$  y otro con  $2s-1s$ . Pero el metano posee todos sus enlaces de igual forma.
2. Hidrógenos enlazados ortogonalmente en orbitales  $2p$  de la capa de valencia del Carbono. Pero experimentalmente la molécula posee a los Hidrógenos separados cada uno en  $109^\circ$  y además no podemos enlazar 4 hidrógenos en 3 casillas  $2p$ . Entonces... ¿Porqué ésta molécula existe?. Porque los orbitales de valencia nativos del Carbono se combinan de tal forma que puedan enlazar 4 Hidrógenos. Ésta es la hibridación  $sp^3$  y entrega un arreglo **tetraédrico**.



## Hibridación $sp^2$

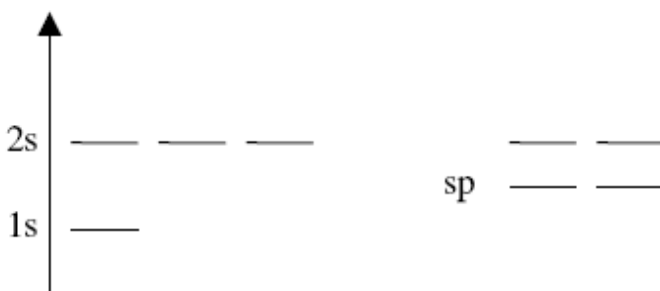
Si escribimos la estructura de Lewis del Etileno ( $C_2H_4$ ), nos damos cuenta que existe un enlace doble entre los dos Carbonos, Por lo que toma la geometría trigonal plana con ángulos entre elementos de  $120^\circ$ , como los átomos de Carbono no poseen esta configuración en su estado nativo, se debe hibridar. Acá sólo necesitamos un orbital  $2s$  y sólo dos  $2p$  del Carbono. La orientación de éstos orbitales híbridos dependerá de qué par de orbitales nativos  $2p$  estemos usando, si usamos  $p_x$  y  $p_y$ , los orbitales híbridos se encontrarán en el plano X-Y y estarán separados entre sí por  $120^\circ$ , mientras que el orbital  $2p$  que no se usó en la combinación se encontrará perpendicular a éste plano.



El rol que juegan los orbitales  $p$  no hibridados es que gracias a éstos existe el enlace doble. Para un Carbono del etileno, dos Hidrógenos están enlazados en dos orbitales  $sp^2$ , mientras que los Carbonos se enlazan entre sí con el orbital  $sp^2$  restante (enlace  $\sigma$ ) y por la región formada entre los orbitales  $2p$  no hibridados (enlace  $\pi$ ).

## Hibridación $sp$

Para el caso del Dióxido de Carbono ( $CO_2$ ), Los Oxígenos están enlazados al Carbono mediante enlaces dobles. Acá por VSEPR y electrón localizado, vemos que ambos oxígenos poseen hibridación  $sp^2$ , pero los Carbonos... Éstos poseen hibridación  $sp$ , ésta se forma al combinar un orbital  $2s$  con un orbital  $2p$ . Como vimos en la hibridación anterior, los orbitales  $2p$  no hibridados definen un plano (y 2 enlaces  $\pi$ ) y entre sí se encuentran ortogonales, lo que da origen a una molécula lineal.



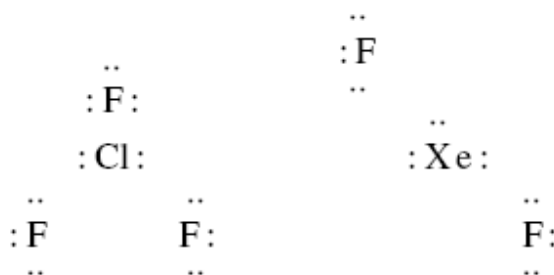
### Hibridaciones $dsp^3$ y $d^2sp^3$

Existe una controversia considerable en cómo los orbitales d están envueltos en el enlace de las moléculas que éste modelo predice. La manera más fácil de identificar a qué hibridación corresponde la molécula es con octetos expandidos. Si expando una vez el octeto, la hibridación será  $dsp^3$  (bipirámide trigonal); en cambio si expando 2 veces el octeto la hibridación será  $d^2sp^3$  (octaédrica). El Pentacloruro de Fósforo ( $PCl_5$ ) y el Tetrafloruro de Xenón ( $XeF_4$ ) ejemplos clásicos de éstas hibridaciones.

**P1. Diga si la moléculas Trifluoruro de Cloro ( $ClF_3$ ) y Difluoruro de Xenón  $XeF_2$  son polares.**

Solución: Primero calculamos Lewis

$ClF_3$	$XeF_2$
EO= 32+2 (Expandimos octeto)	EO=24+2 (Expandimos octeto)
EV= 28	EV=22
3 enlaces	2 enlaces
22 electrones libres	18 electrones libres



Hibridación:

$dsp^3$

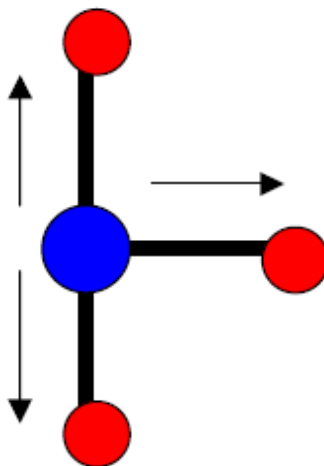
$dsp^3$

Geometría:

Forma T

Lineal

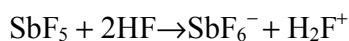
Al ser lineal el momento dipolar de XeF<sub>2</sub> es cero. Por lo tanto es apolar.  
En cambio ClF<sub>3</sub>:



El único vector que cuenta es el que está horizontal (los otros se anulan). Aproximando las electronegatividades del Cloro (X=3) y del Flúor (X=4), el momento dipolar vale:

$$\mu_x = (4 - 3) \cdot \cos(0^\circ) = 1$$

**P2. Para la siguiente reacción:**



**Indique Geometría, Hibridación del átomo central y ordénelas de acuerdo a la magnitud de su momento dipolar. Sb(Z=51) F(Z=9)**

Solución: Sb tiene 5 electrones de valencia, F tiene 9 y H uno.

	$\text{SBF}_5$	$\text{HF}$	$\text{SBF}_6^-$	$\text{H}_2\text{F}^+$
e octeto	$8+8 \cdot 5=48+2$	$2+8=10$	$8+8 \cdot 6=56+2+2$	$2 \cdot 2+8=12$
e valencia	$5+7 \cdot 5=40$	$1+7=8$	$5+42+1=48$	$1 \cdot 2+7 \cdot 1=8$
EO-EV	10	2	12	4
n° enlaces	5	1	6	2
n° electrones libres	30	6	36	4
Geometría	dipirámide trigonal	Mol. Diatómica	Octaédrica	Angular
Hibridación	$\text{dsp}^3$	N/A	$\text{d}^2\text{sp}^3$	$\text{sp}^3$

Veamos el diagrama de Hibridaciones:

SbF<sub>5</sub>

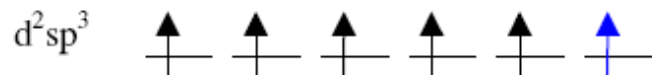


Quedan 5 electrones de valencia desapareados para compartir enlace con los 5 flúor.

HF:

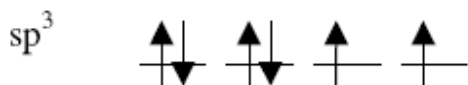
Como es molécula diatómica, ésta teoría no es aplicable.

SbF<sub>6</sub><sup>-</sup>



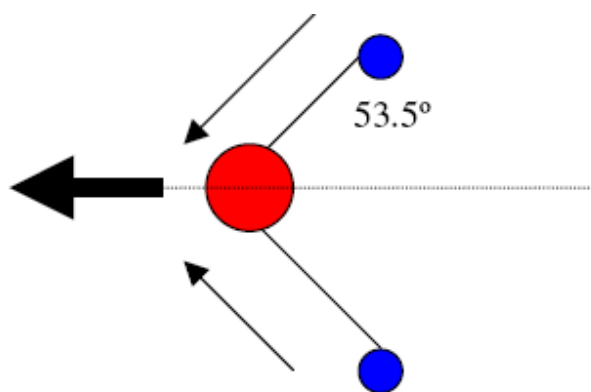
Quedan 5 electrones de valencia + 1 extra del ión (en azul) libres para compartir con 6 flúor.

$\text{H}_2\text{F}^+$ :



Hay 6 electrones del Flúor (carga positiva) para llenar en 4 casillas. Acá quedan 2 apareados que corresponden al número de pares de electrones libres (2), y quedan 2 desapareados para compartir con 2 Flúor.

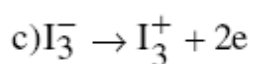
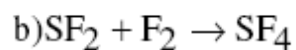
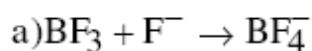
¿Cómo calculamos el momento dipolar si no poseemos los datos de electronegatividad? De partida,  $\text{SbF}_5$ ,  $\text{SbF}_6^-$  son apolares (geometría ideal). Tenemos que HF, por ser diatómica heteronuclear posee un cierto momento dipolar. Calculemos el momento dipolar del  $\text{H}_2\text{F}^+$ :



$$\mu = 2 \cdot |\mu_{\text{HF}}| \cdot \cos(53.5) = 1.18 \cdot |\mu_{\text{HF}}|$$

$$\mu_{\text{HF}} < \mu_{\text{H}_2\text{F}^+}$$

**P3. Explique qué cambios de hibridación se ven en las siguientes reacciones:**



**B(Z=5) F(Z=9) S(Z=16) I(Z=53)**

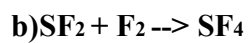


Boro tiene 3 electrones de Valencia, Flúor 9.

Átomo central: Boro

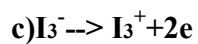
**BF<sub>3</sub>**: Éste compuesto era una de las excepciones a la regla del octeto (octeto contraído). Su forma más estable era con 3 enlaces simples y posee hibridación sp<sup>2</sup> (Triagonal Plana)

**BF<sub>4</sub><sup>-</sup>**: Molécula tetraédrica, hibridación sp<sup>3</sup>



**SF<sub>2</sub>**: Molécula Angular (AX<sub>2</sub>E<sub>2</sub>), hibridación sp<sup>3</sup>

**SF<sub>4</sub>**: Hibridación dsp<sup>3</sup> (Balancín)



I tiene 7 electrones de valencia.

**I<sub>3</sub><sup>-</sup>**: Hibridación dsp<sup>3</sup> (Lineal)

**I<sub>3</sub><sup>+</sup>**: Hibridación sp<sup>3</sup> (Angular)

**P4. Para el ión tiosulfato  $S_2O_3^{-2}$ , indique la estructura más estable y la hibridación de los átomos de azufre.**

Lewis:

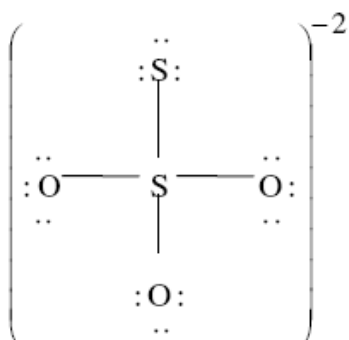
EV Azufre=6, EV Oxígeno=6.

EO=40                      CF(S)=6-6-1= -1

EV=30+2=32              CF(S)=6-4=2

4 Enlaces                  CF(O)=6-7= -1

24 electrones libres.



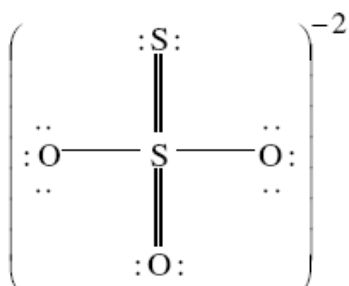
Pero ésta molécula tiene cargas formales muy altas... expandimos el octeto 2 veces.

EO=44                      CF(S)=6-6=0

EV=32                      CF(S)=6-4-2=0

6 Enlaces                  CF(O)=6-7= -1

20 electrones libres.



Ahora si... Las hibridaciones de los Oxígenos con enlace doble son  $sp^2$ , la del Azufre central es  $d^2sp^3$  y la del azufre que queda es  $sp^2$ .