DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA, BIOTECNOLOGÍA Y MATERIALES
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
UNIVERSIDAD DE CHILE

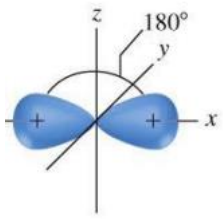
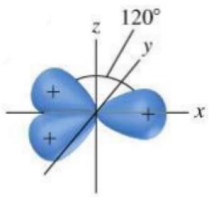
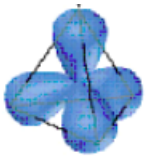
IQ2211-7 Química Semestre Otoño 2024
Profesor: Pablo Mella
Auxiliares: Deborah Marín
Juan Miranda
Jorge Palma
Ayudante: Karen Yunge

Resumen Auxiliar 3: "Hibridación y TOM"

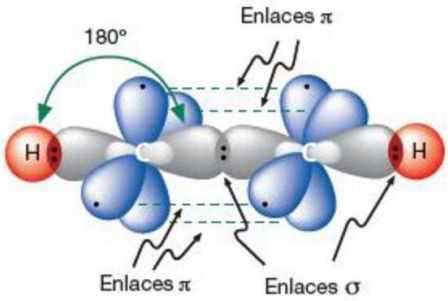
Hibridación

- Solapamiento de 2 o más orbitales atómicos para formar nuevos orbitales híbridos, con una forma distinta a los originales.
- El número de orbitales híbridos es igual al número de orbitales puros usados en la hibridación.

Tipos de hibridación y su relación con geometrías:

AX_2	AX_3	AX_4	AX_5	AX_6
sp	sp^2	sp^3	sp^3d	sp^3d^2
				

Teoría de orbitales moleculares

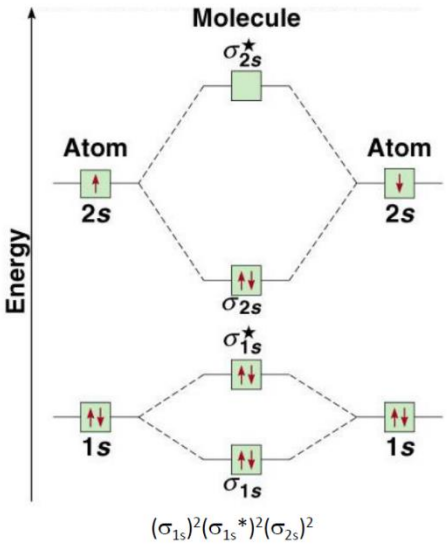


Enlace simple	1 enlace σ
Enlace doble	1 enlace σ y 1 enlace π
Enlace triple	1 enlace σ y 2 enlace π

Orden de enlace: $OE = \frac{1}{2}(\#e^{-}enlace - \#e^{-}antienlace)$

Orbital enlazante (σ)	Orbital antienlazante (σ*)
Mayor la densidad electrónica entre los átomos enlazados. Tienen menos energía que los orbitales atómicos. Son más estables. (Promueve enlace covalente estable).	Menor la densidad electrónica entre los átomos enlazados. Tienen más energía que los orbitales atómicos. Son menos estables. (Promueve enlace covalente inestable).

En el diagrama de orbitales moleculares (OM):



1. El número de orbitales moleculares formados es siempre igual al número de orbitales atómicos combinados.
2. Mientras más estable sea el orbital enlazante más inestable es el orbital antienlazante.
3. El llenado debe realizarse desde los niveles más bajos de energía hacia arriba.
4. Cada orbital puede aceptar un máximo de dos electrones.
5. Se debe cumplir la regla de Hund al poner electrones en orbitales de igual energía.
6. El número de electrones en los orbitales moleculares es igual a la suma de todos los electrones en los átomos enlazados.

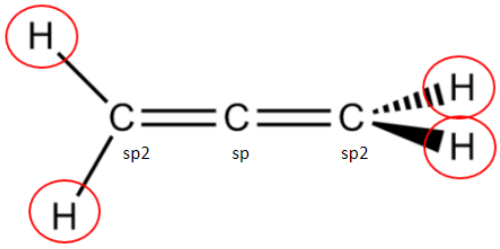
Ejercicio resuelto

El hidrocarburo aleno H2C = C = CH2, se obtiene directamente a partir del petróleo y se usa como precursor para varios tipos de plásticos.

1. ¿Por qué el aleno no presenta rotación molecular? ¿Qué orbitales participan en la formación de los enlaces que le confieren esta característica?
2. ¿Cuántos enlaces se forman por traslape orbitales híbridos con no híbridos? Justifique indicando cuáles son estos enlaces.
3. Represente el proceso de hibridación de los carbonos en la estructura utilizando πσ diagramas de orbitales para la configuración electrónica.
4. Dibuje un diagrama de traslape de orbitales que muestran los enlaces σ para el aleno y el arreglo de los enlaces π. Asegúrese de representar la geometría de la molécula en tres dimensiones.

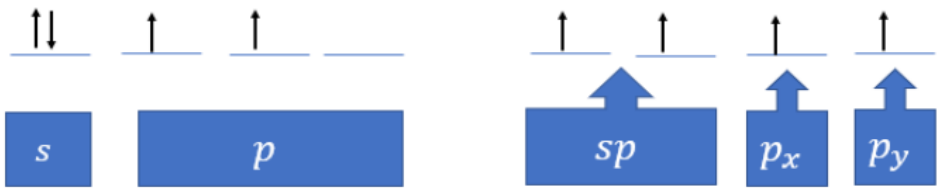
Respuestas:

1. Debido a la presencia de enlace doble (enlaces π). Los orbitales 2p no híbridos.
2. Son 4 enlaces, traslape sp2 del Carbono con el s del Hidrógeno.

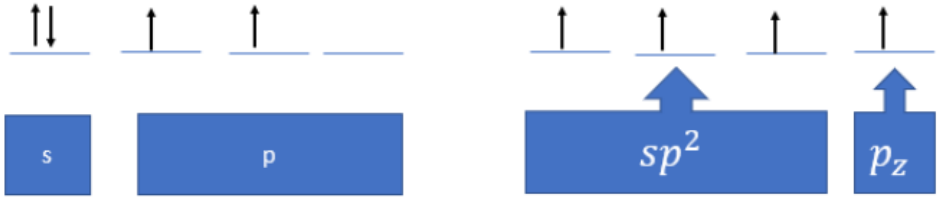
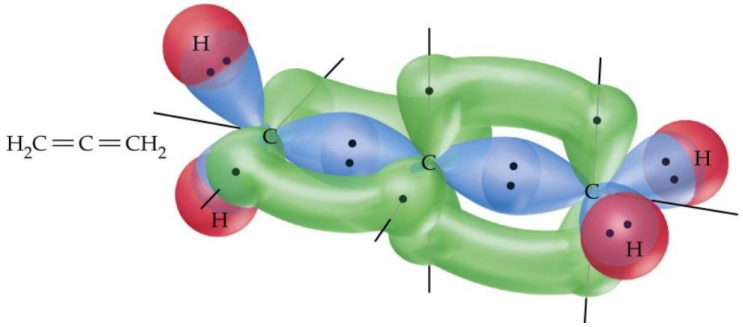


3. C= [He] 2s2 2p2

Carbono central:



Carbonos laterales:



4.