

## ORBITALES HIBRIDOS $sp^3$

Para terminar el tema de orbitales híbridos s y p, se tratará de los  $sp^3$ . Las funciones de onda que se combinarán en principio para formar cuatro orbitales híbridos  $sp^3$  son la 2s, 2px, 2py y 2pz en las siguientes combinaciones lineales:

$$\Psi_1 = \frac{1}{2}s + \frac{\sqrt{3}}{2}pz ; \quad \Psi_2 = \frac{1}{2}s + \sqrt{\frac{2}{3}}px - \sqrt{\frac{1}{12}}pz ; \quad \Psi_3 = \frac{1}{2}s - \sqrt{\frac{1}{6}}px + \sqrt{\frac{1}{2}}py - \sqrt{\frac{1}{12}}pz \quad y$$

$$\Psi_4 = \frac{1}{2}s - \sqrt{\frac{1}{6}}px - \sqrt{\frac{1}{2}}py + \sqrt{\frac{1}{12}}pz \quad (1)$$

Ahora bien, la función de onda 2s como se ha visto tiene por ecuación general:

$$\psi_{2s} = \left( \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \right) * \left( \frac{Z'}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} * \left( 2 - \frac{Z'r}{a_0} \right) * e^{-\frac{Z'r}{2a_0}} \quad (2)$$

mientras que la 2px :  $\Psi(2,1,1) = 0,1xe^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{2}}$  ; la 2py :  $\Psi(2,1,-1) = 0,1ye^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{2}}$

y la 2pz :  $\Psi(2,1,0) = 0,1ze^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{2}}$

(3)

Sustituyendo 2, y 3 en 1, se obtendrán las funciones de onda de los orbitales híbridos a representar

Como en el tema anterior, se tomará para el C,  $Z'=3,15$ . Para el N,  $Z'=3,8$ . Para el O,  $Z'=4,45$  y para el F,  $Z'=5,1$

Como se trata de comparar orbitales híbridos siempre se representará para cada átomo, la función  $R_1$  de sus orbitales híbridos  $sp^3$

La representación aplicando el programa matemático de gráficas superficiales, tomando el eje z como x tal como en temas anteriores, viene dada por las figuras 1 a 8

**ORBITAL HÍBRIDO sp<sup>3</sup>**  
**Átomo de carbono**

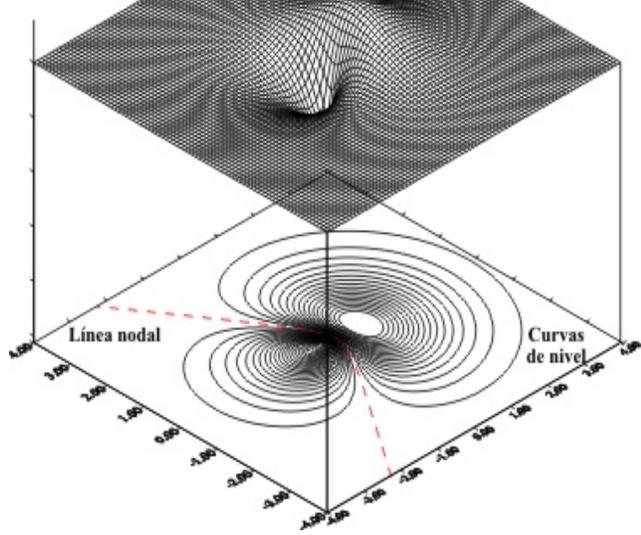


Fig. 1

**ORBITAL HÍBRIDO sp<sup>3</sup>**  
**Átomo de carbono. Curvas de nivel**

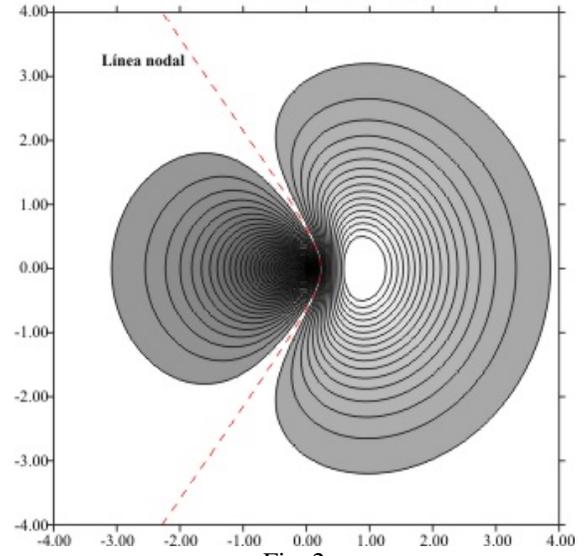


Fig. 2

**ORBITAL HÍBRIDO sp<sup>3</sup>**  
**Átomo de nitrógeno**

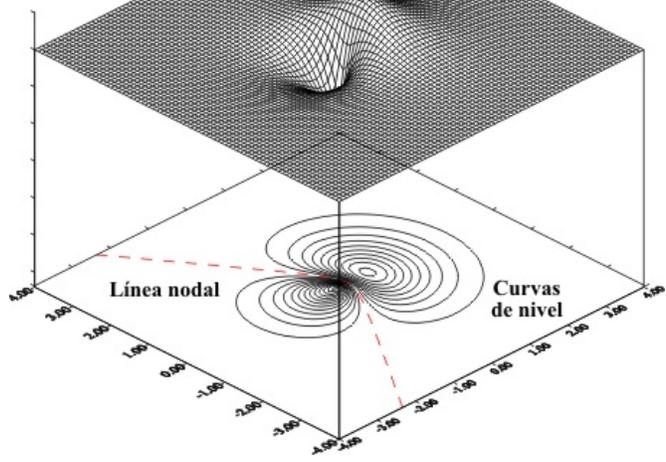


Fig. 3

**ORBITAL HÍBRIDO sp<sup>3</sup>**  
**Átomo de nitrógeno. Curvas de nivel**

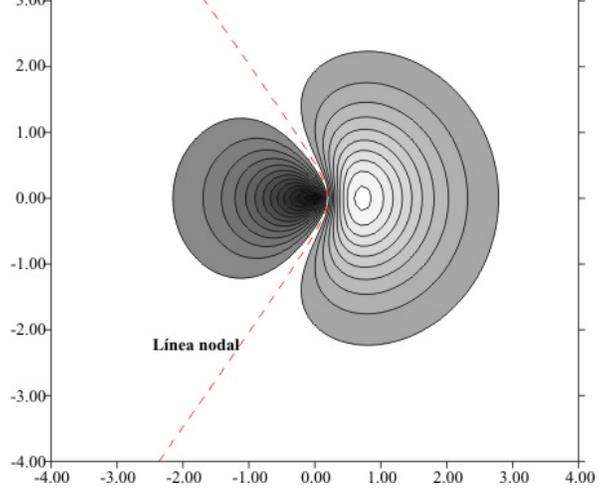


Fig. 4

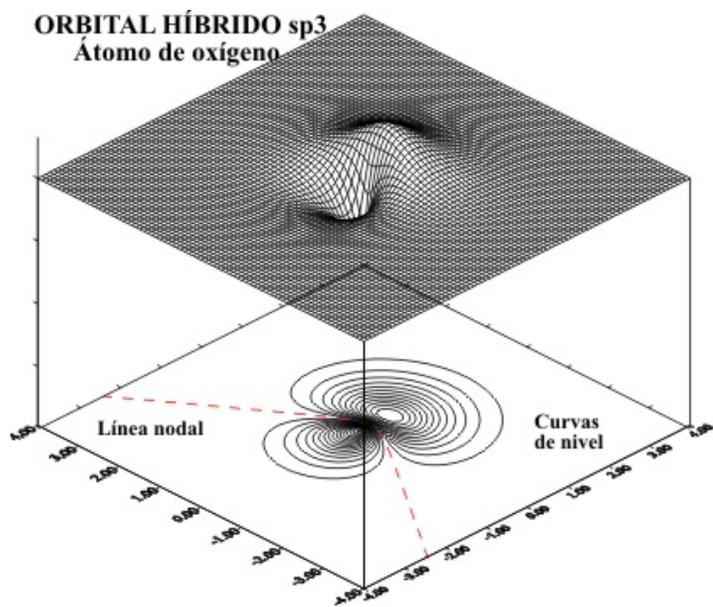


Fig. 5

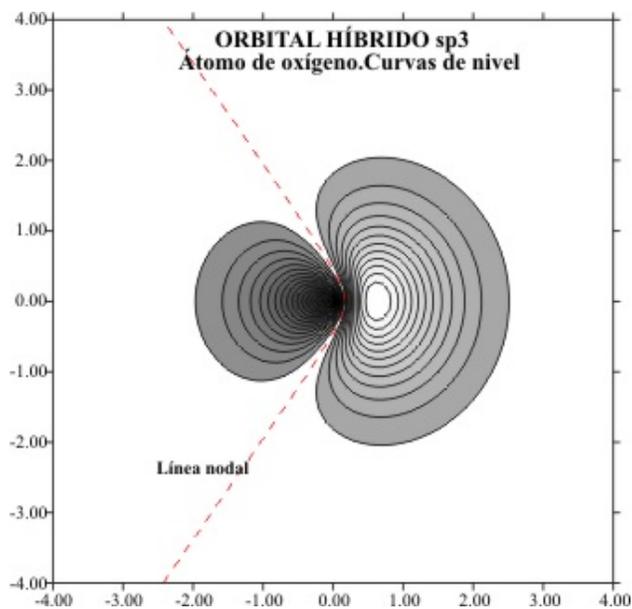


Fig. 6

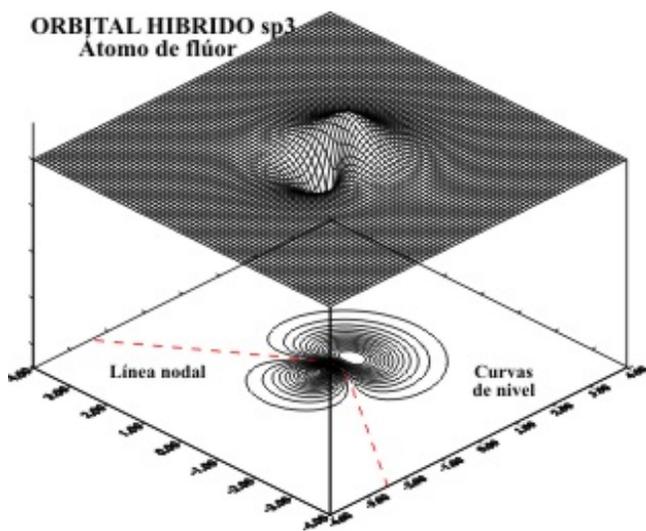


Fig. 7

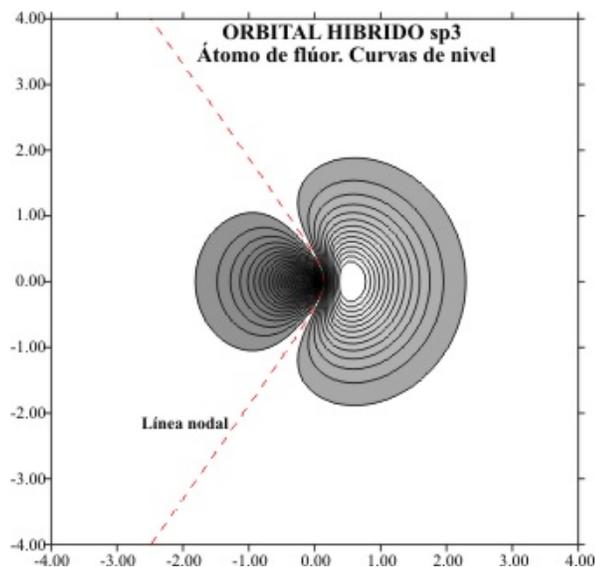


Fig. 8

Como se observa especialmente en los dibujos de curvas de nivel, el avance del extremo del lóbulo enlazante varía desde el carbono que llega hasta los 3,8 bohr, hasta el flúor que alcanza los 2,5 bohr. El lóbulo no enlazante varía también desde -3 bohr hasta -1,7 bohr.

Las densidades de probabilidad que se obtienen elevando al cuadrado las funciones de onda, tienen un aspecto algo diferente, aunque varían desde el carbono al flúor de la misma manera como se puede observar en las gráficas de las figuras 9 y 10.

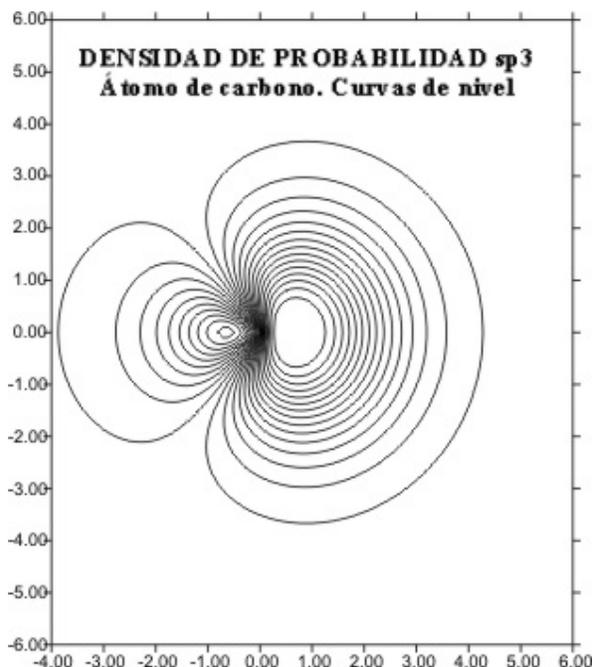


Fig. 9

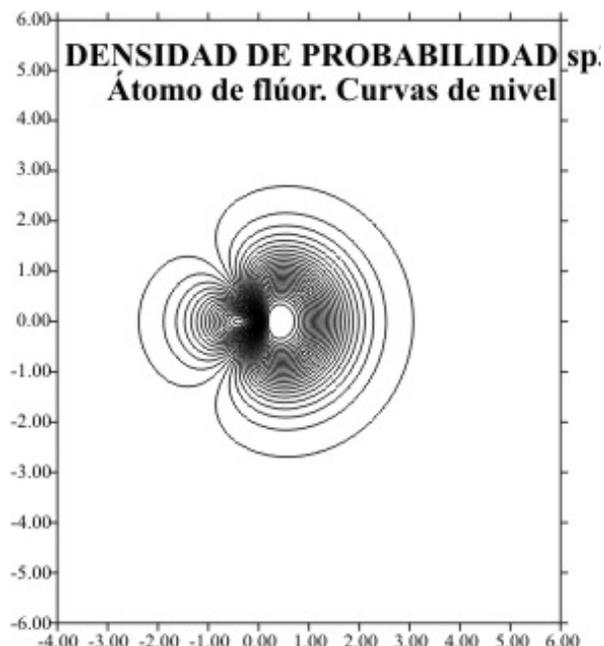


Fig. 10

Si ahora se trabaja con las funciones de onda 3s, 3p<sub>x</sub> y 3p<sub>y</sub>, a fin de formar los orbitales híbridos de elementos del mismo grupo pero del periodo siguiente, se deberá considerar la variación de la carga nuclear efectiva, que para el Si es 4,28, para el P, 4,886, para el S, 5,48 y para el Cl, 6,116.

Se presentan las curvas de nivel del primero y último para observar su variación; corresponden a las figuras 11 y 12. En estos orbitales los dos lóbulos están mucho menos diferenciados que en los anteriores.

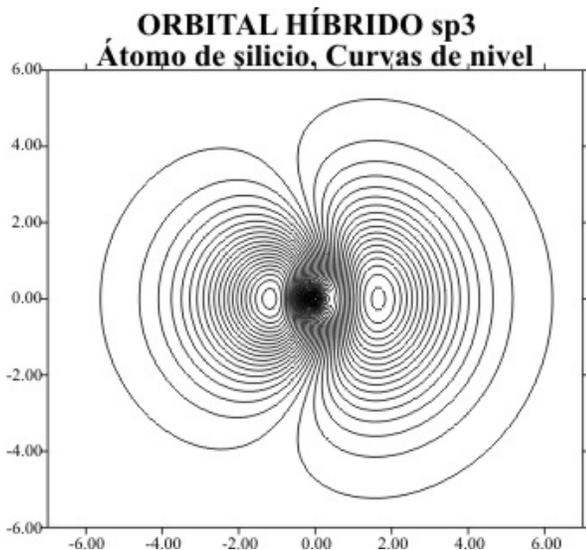


Fig. 11

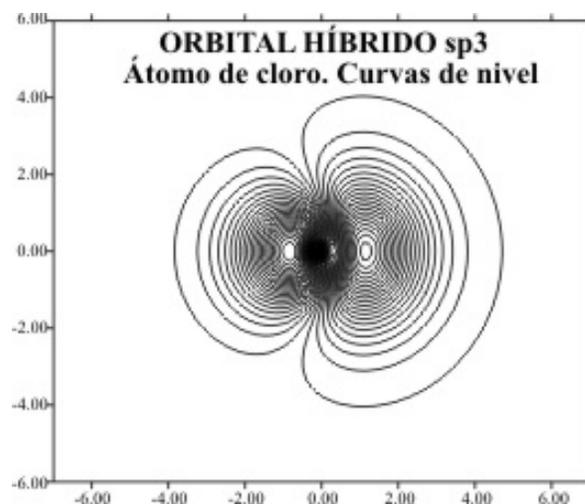


Fig. 12

Ahora se va a establecer la comparación total entre los diferentes orbitales híbridos  $sp^X$ , y su variación, haciendo un resumen de los tres trabajos presentados, tomando como referencia los híbridos en el C

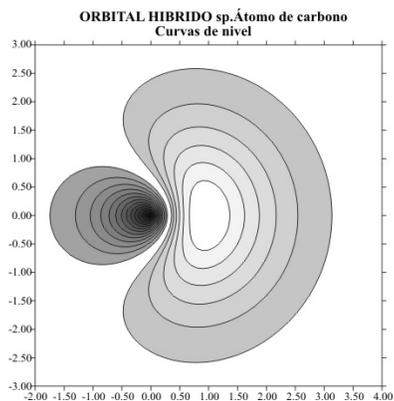


Fig. 13

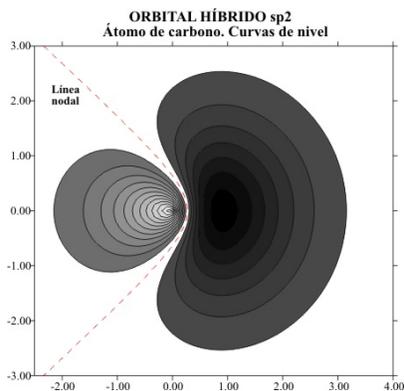


Fig. 14

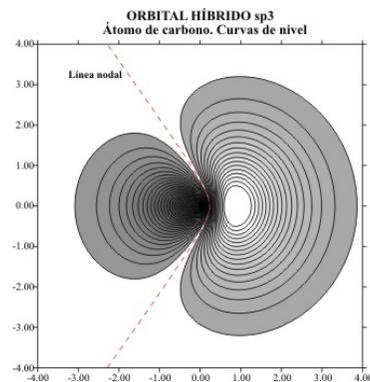


Fig. 15

Se aprecia perfectamente que tanto el lóbulo no enlazante como el enlazante van aumentando en superficie, especialmente el negativo, por ello la forma externa se va modificando. Los dos lóbulos están mucho mas diferenciados en el  $sp$ , que en el  $sp^3$ .