

ORBITALES HIBRIDOS sp^2

Las funciones de onda que se combinarán para formar dos orbitales híbridos sp^2 son la 2s, 2px y 2py en las siguientes combinaciones lineales:

$$\Psi_1 = \sqrt{\frac{1}{3}}s + \sqrt{\frac{2}{3}}px \quad \Psi_2 = \sqrt{\frac{1}{3}}s - \sqrt{\frac{1}{6}}px + \sqrt{\frac{1}{2}}py \quad \Psi_3 = \sqrt{\frac{1}{3}}s - \sqrt{\frac{1}{6}}px - \sqrt{\frac{1}{2}}py \quad (1)$$

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

$$\psi_{2px} = \left(\frac{1}{\sqrt{32\pi}} \right) * \left(\frac{Z'}{a_0} \right)^{\frac{5}{2}} * x e^{-\frac{Z'r}{2a_0}} = 0.1 * \left(\frac{Z'}{a_0} \right)^{\frac{5}{2}} * x e^{-\frac{Z'r}{2a_0}} \quad (3)$$

y la 2py

$$\psi_{2py} = \left(\frac{1}{\sqrt{32\pi}} \right) * \left(\frac{Z'}{a_0} \right)^{\frac{5}{2}} * y e^{-\frac{Z'r}{2a_0}} = 0.1 * \left(\frac{Z'}{a_0} \right)^{\frac{5}{2}} * y e^{-\frac{Z'r}{2a_0}} \quad (4)$$

siendo como en desarrollos anteriores, Z' la carga nuclear efectiva, y $a_0 = 1$, al referirse a unidades bohr. Sustituyendo 2,3 y 4 en 1, se obtendrán las funciones de onda de los orbitales híbridos a representar

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

En el C,

$$\Psi_{1sp^2} = 0,335 \left(\left(2 - 3,15\sqrt{(x^2 + y^2)} \right) e^{-\frac{3,15\sqrt{(x^2 + y^2)}}{2}} \right) + 1,4335 x e^{-\frac{3,15\sqrt{(x^2 + y^2)}}{2}}$$

La representación tal como en temas anteriores será

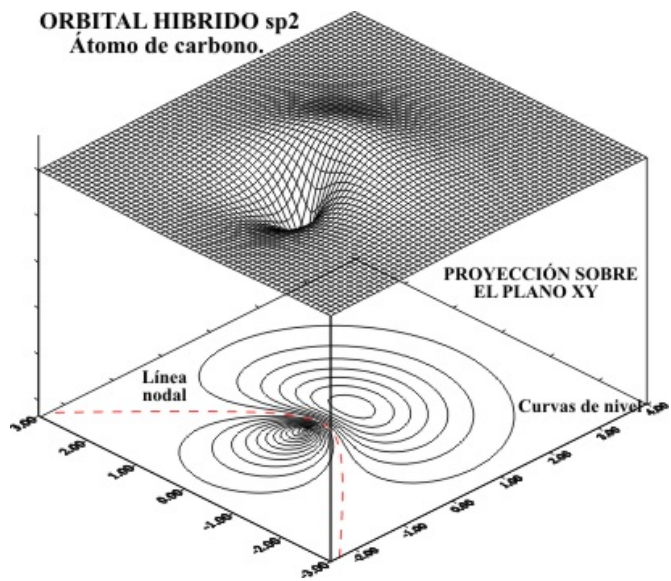


Fig. 1

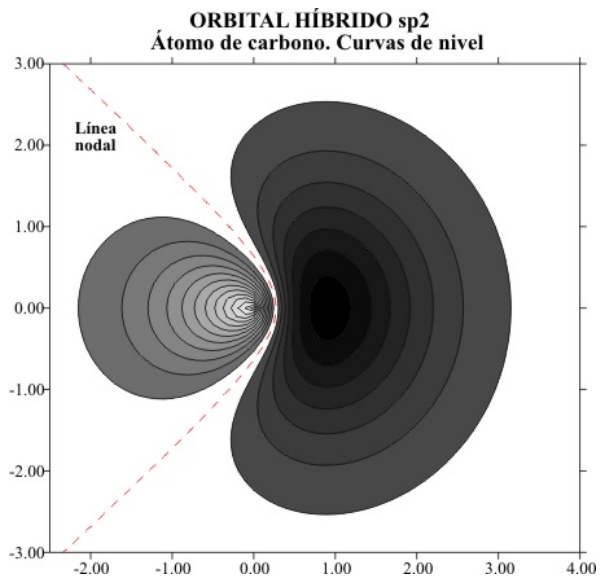


Fig. 2

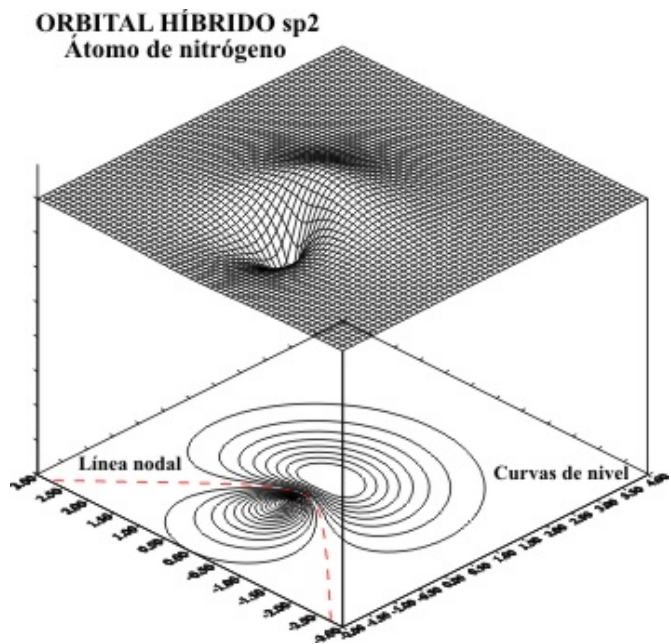


Fig. 3

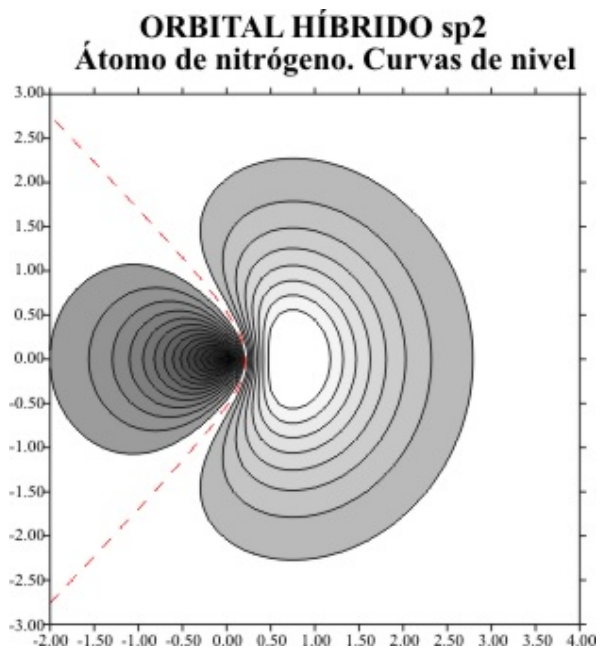


Fig. 4

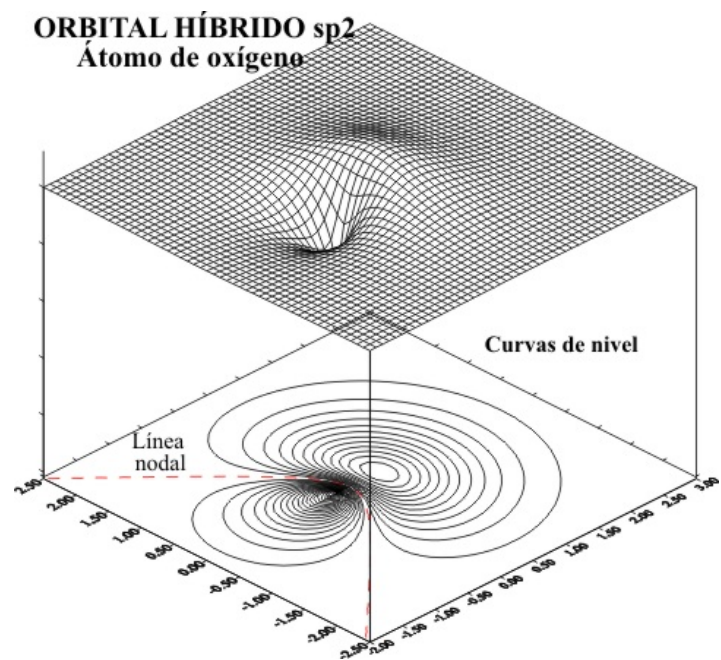


Fig. 5

Como se observa especialmente en los dibujos de curvas de nivel, el avance del extremo del lóbulo enlazante varía desde el carbono 3,2 bohr, hasta el flúor 2,3 bohr. El lóbulo no enlazante varía mucho menos, desde -2,1 bohr hasta -1,7 bohr

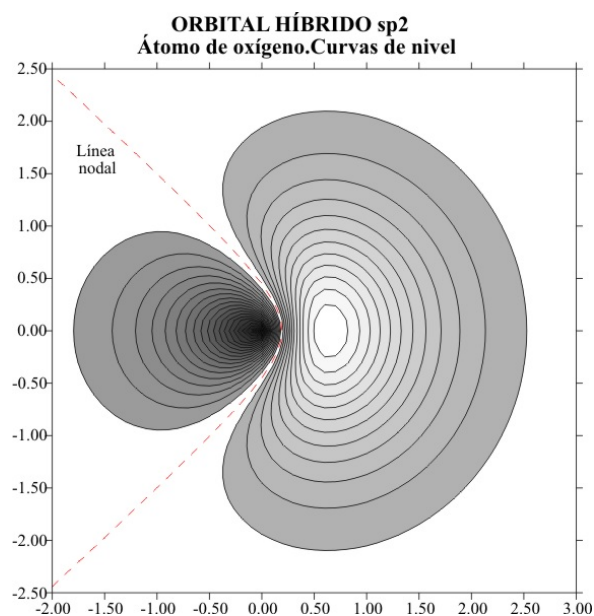


Fig. 6

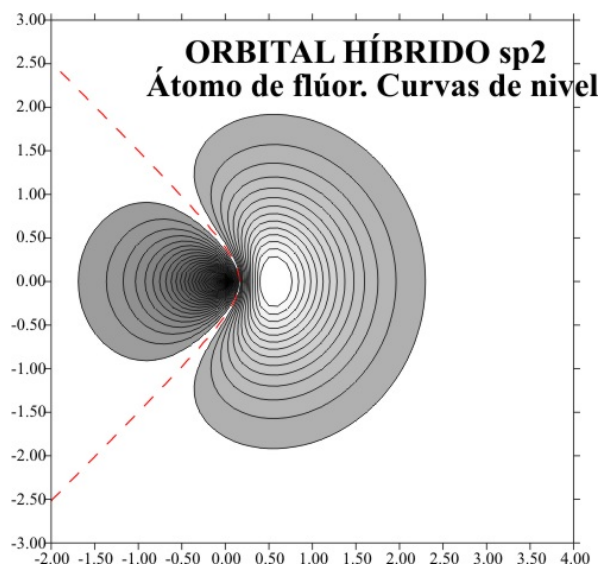
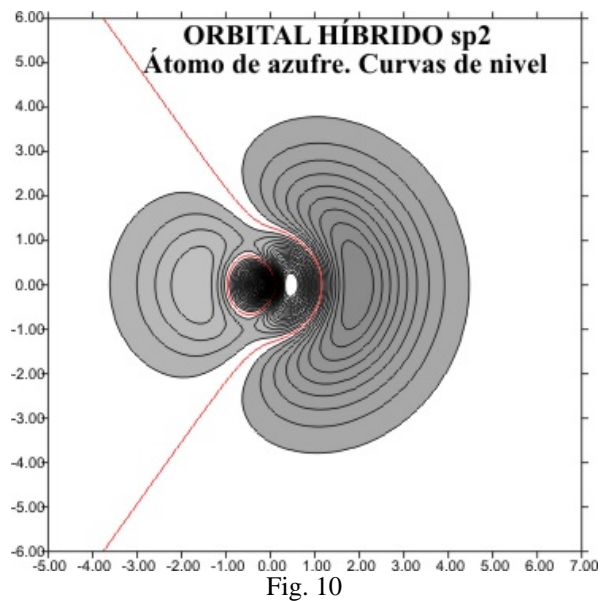
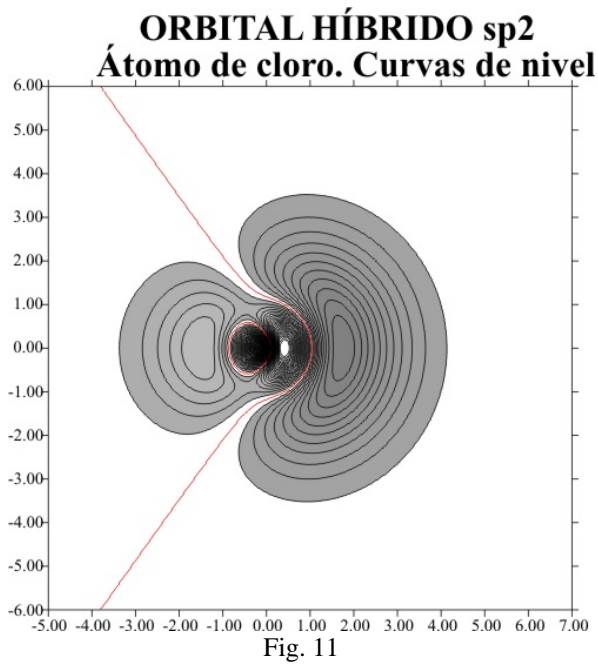
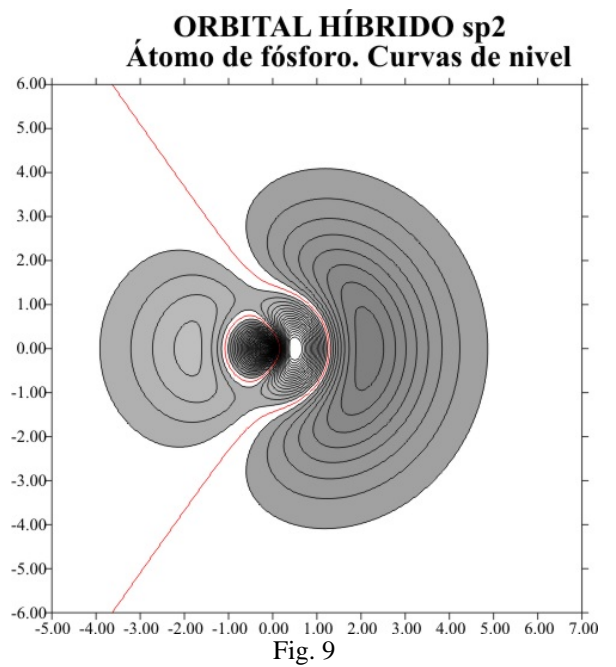
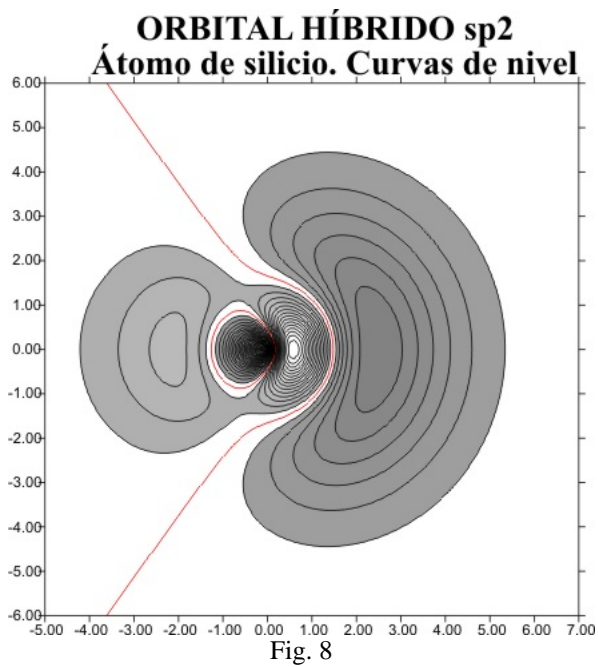


Fig. 7

Si ahora se trabaja con las funciones de onda 3s, 3px y 3py, 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

Las curvas del nivel respectivas corresponden a las fig 8,9



La observación detallada de los dibujos permite establecer las diferencias entre estos orbitales y los de los elementos que encabezan sus respectivos grupos, tanto en el lóbulo enlazante como en el no apto para la superposición. Por lo tanto he aquí aclarado uno de los tópicos más generalizados en los libros de textos; no se pueden dibujar los orbitales híbridos sp^2 de diferentes átomos como si fueran iguales, ya que no lo son; ni en la forma ni en el tamaño.