

## TEORÍA DEL ENLACE DE VALENCIA

Esta teoría supone que:

- Dos átomos forman un enlace covalente cuando se superponen o solapan orbitales atómicos de ambos, originando una zona común de alta densidad electrónica con dos electrones de espines apareados.
- Los orbitales deben ser de la capa de valencia, tener electrones desapareados de espines opuestos y energía semejante.
- Si el solapamiento de los orbitales es frontal se forma un enlace covalente tipo **sigma ( $\sigma$ )**



- Si el solapamiento de los orbitales es lateral se forma un enlace covalente tipo **pi ( $\pi$ )**.

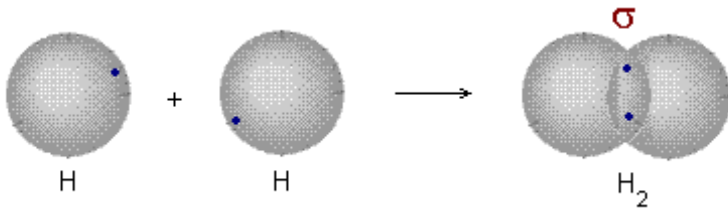


- Llamamos **covalencia** de un elemento al número de enlaces covalentes que puede formar, esto es, al número de electrones desapareados.

## EJEMPLOS

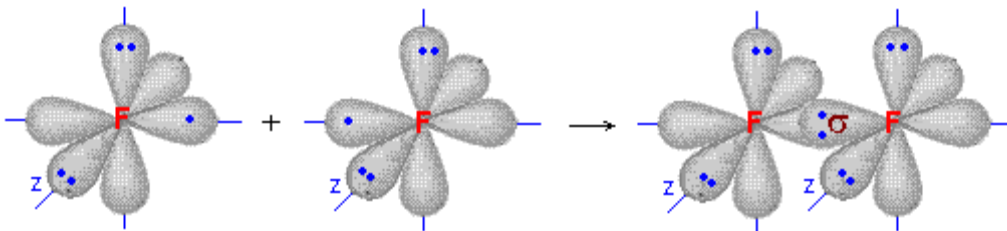
### 1. H<sub>2</sub>

El hidrógeno tiene 1 electrón en su orbital 1s, de manera que se irían acercando los átomos hasta que se solapan los orbitales 1s de los hidrógenos, dando lugar a un enlace  $\sigma$ .



### 2. F<sub>2</sub>

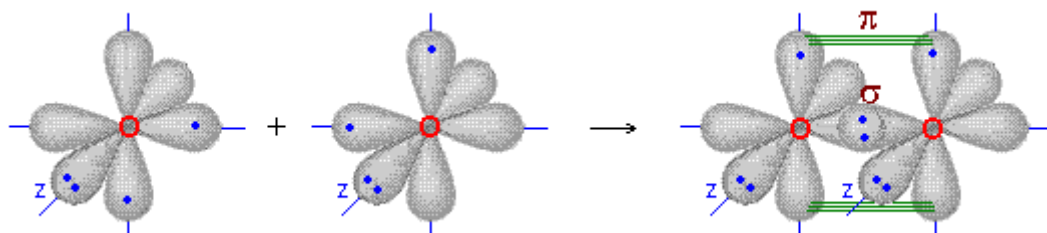
El flúor tiene una configuración  $1s^2 2s^2 p^5$  y resulta que el electrón desapareado y que por tanto formará enlace está en uno de los orbitales p, así que estos orbitales son los que se solaparían dando lugar a un enlace  $\sigma$



### 3. O<sub>2</sub>

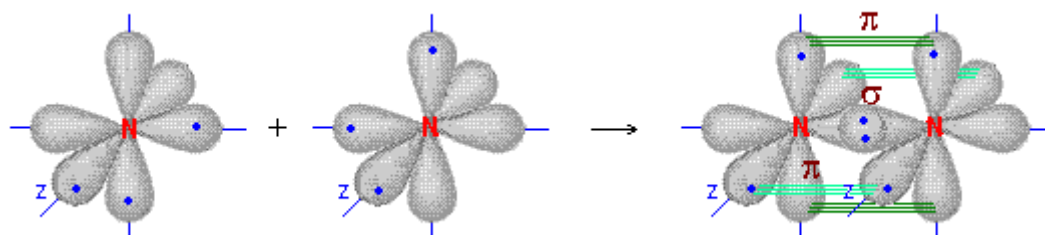
El oxígeno tiene estructura  $1s^2 2s^2 p^4$  y tiene 2 electrones desapareados, y por tanto **covalencia 2** y formará 2 enlaces. Cuando los dos átomos de oxígeno se acerquen:

- Los orbitales p que tienen la misma dirección se solapan frontalmente sin problemas y dan lugar a un **enlace  $\sigma$** .
- Los orbitales p que son paralelos, se solapan con más dificultad y forman un **enlace del tipo  $\pi$** , que se representa con unas rayas uniendo los dos lóbulos de cada orbital.



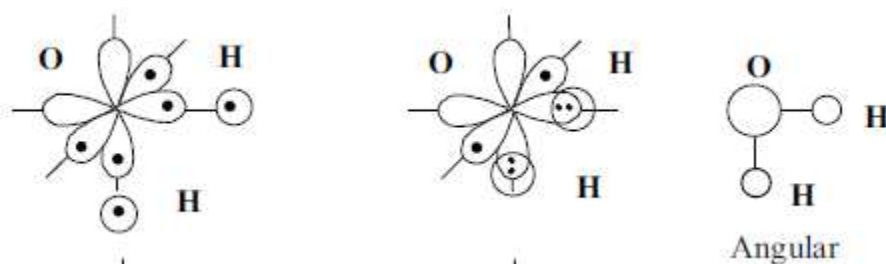
## 4. $N_2$

La molécula de nitrógeno se explica de la misma forma. El nitrógeno que tiene configuración estructural  $1s^2 2s^2 p^3$  y tiene 3 electrones desapareados, y por tanto **covalencia 3** y formará enlaces. Uno de ellos, el que se forme por **solapamiento de orbitales p en la misma dirección será  $\sigma$**  y los dos restantes que se forman **entre orbitales p paralelos serán del tipo  $\pi$** .



## 5. H<sub>2</sub>O

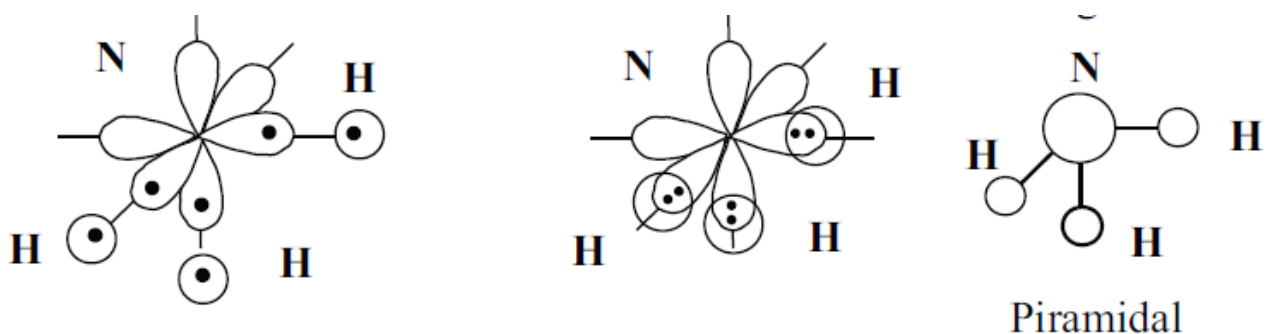
El agua, donde el átomo central es el oxígeno, con una configuración  $1s^2 2s^2 p^4$  resulta que tiene dos electrones desapareados y que por tanto formará **dos enlaces  $\sigma$**  por solapamiento de éstos con los orbitales **1s** del hidrógeno:



De acuerdo con esto, en la molécula de agua el ángulo de enlace sería de  $90^\circ$  (no concuerda con el real,  $104,5^\circ$ ).

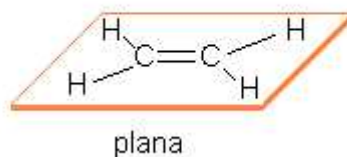
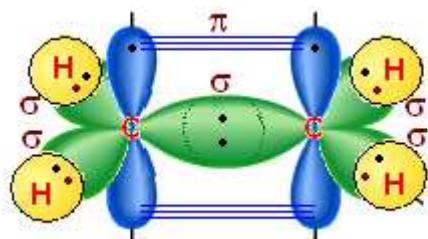
## 6. NH<sub>3</sub>

Se formarán **tres enlaces  $\sigma$**  por solapamiento de orbitales p del nitrógeno con los orbitales **1s** del hidrógeno:

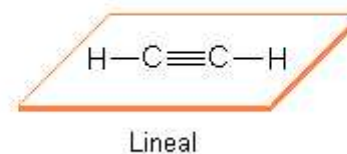
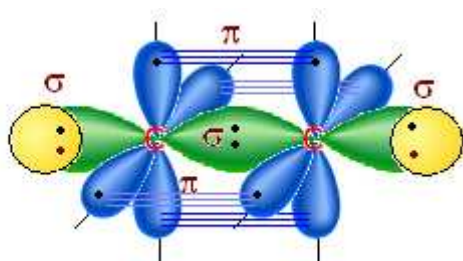


Aquí también el ángulo de enlace sería de  $90^\circ$  (no concuerda con el real,  $107,5^\circ$ ).

## 7. $\text{CH}_2 = \text{CH}_2$ (eteno)



## 8. $\text{CH} \equiv \text{CH}$ (etino)



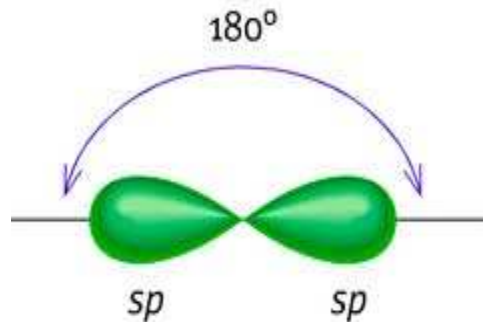
## TEORÍA DE HIBRIDACIÓN DE ORBITALES

Para explicar la geometría de la moléculas (ángulos y distancia) y la covalencia de ciertos átomos se formuló la "teoría de la hibridación". Esta teoría acepta que, previamente a la formación del enlace covalente, se produzca la **hibridación de orbitales atómicos**, es decir, la "mezcla" de orbitales que da lugar a otros nuevos con características geométricas diferentes a las de los orbitales originales.

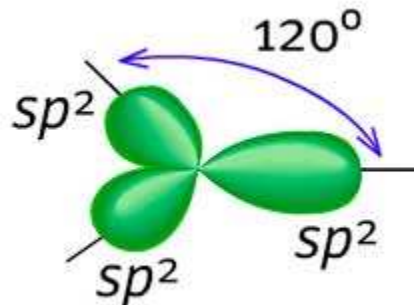
El número de orbitales híbridos formados, es igual al de orbitales atómicos que se combinan y su forma y orientación depende de la cantidad y tipo de orbitales atómicos que pasen a formar el híbrido.

Las hibridaciones más comunes se producen entre orbitales s y orbitales p:

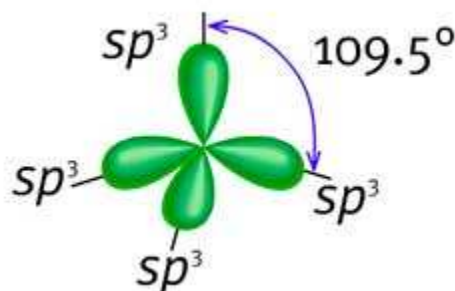
La combinación de un orbital s y un orbital p da lugar a dos híbridos  $sp$  que se disponen formando un ángulo de  $180^\circ$



La combinación de un orbital s y dos orbitales p da lugar a tres híbridos  $sp^2$  que se disponen formando ángulos de  $120^\circ$



La combinación de un orbital s y tres orbitales p da lugar a cuatro híbridos  $sp^3$  que se disponen formando ángulos de  $109,5^\circ$



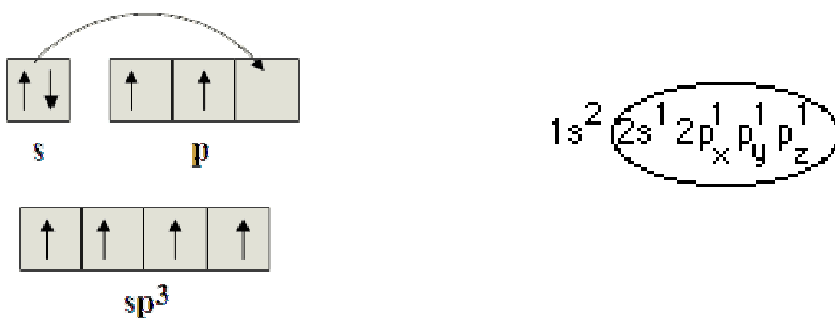
Por ejemplo el carbono (C) forma cuatro enlaces en compuestos como el  $\text{CH}_4$  y en la mayoría de compuestos que forma.

El número atómico de Carbono es 6. Por lo tanto, contiene un total de 6 electrones, cuya configuración es la siguiente:  $1s^2 2s^2 2p^2$

Aplicando la regla de Hund la distribución será:



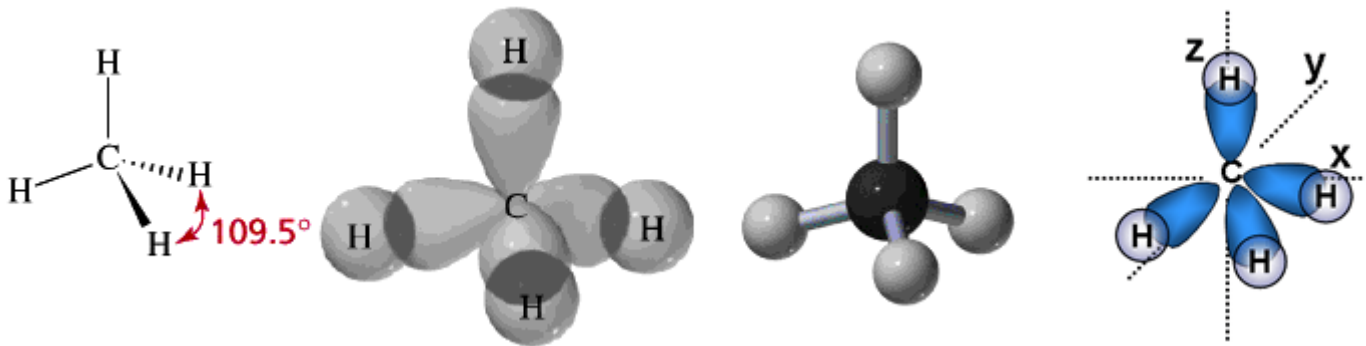
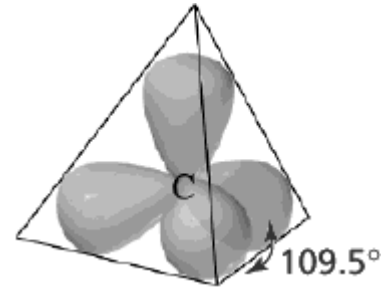
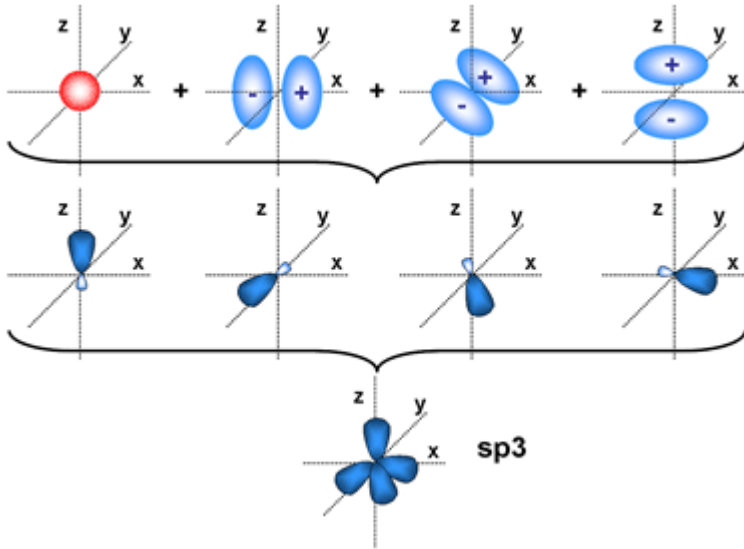
Para el proceso de hibridación se requiere que el electrón del orbital  $2s$  se desplace hacia al orbital vacante  $p$  de ese mismo nivel energético. Al culminar la excitación electrónica todos los orbitales del nivel 2 poseen un electrón. Ahora la covalencia es 4 y por ese motivo puede enlazarse con 4 átomos de hidrógeno.



Sin embargo el estudio de los enlaces revela que todos son exactamente iguales, lo cual hace pensar que previamente a la formación de un enlace covalente, los orbitales de la capa de valencia se combinan obteniéndose el mismo de orbitales, pero ahora, todos son idénticos, en este caso cuatro híbridos  $sp^3$  orientados hacia los ápices (puntas) de un tetraedro



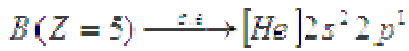
regular, con ángulos cercanos a  $109.5^\circ$ , y que solaparán con orbitales **s** de cada átomo de hidrógeno.



Las moléculas de agua y amoniaco también se pueden explicar con este tipo de **orbitales híbridos  $sp^3$**

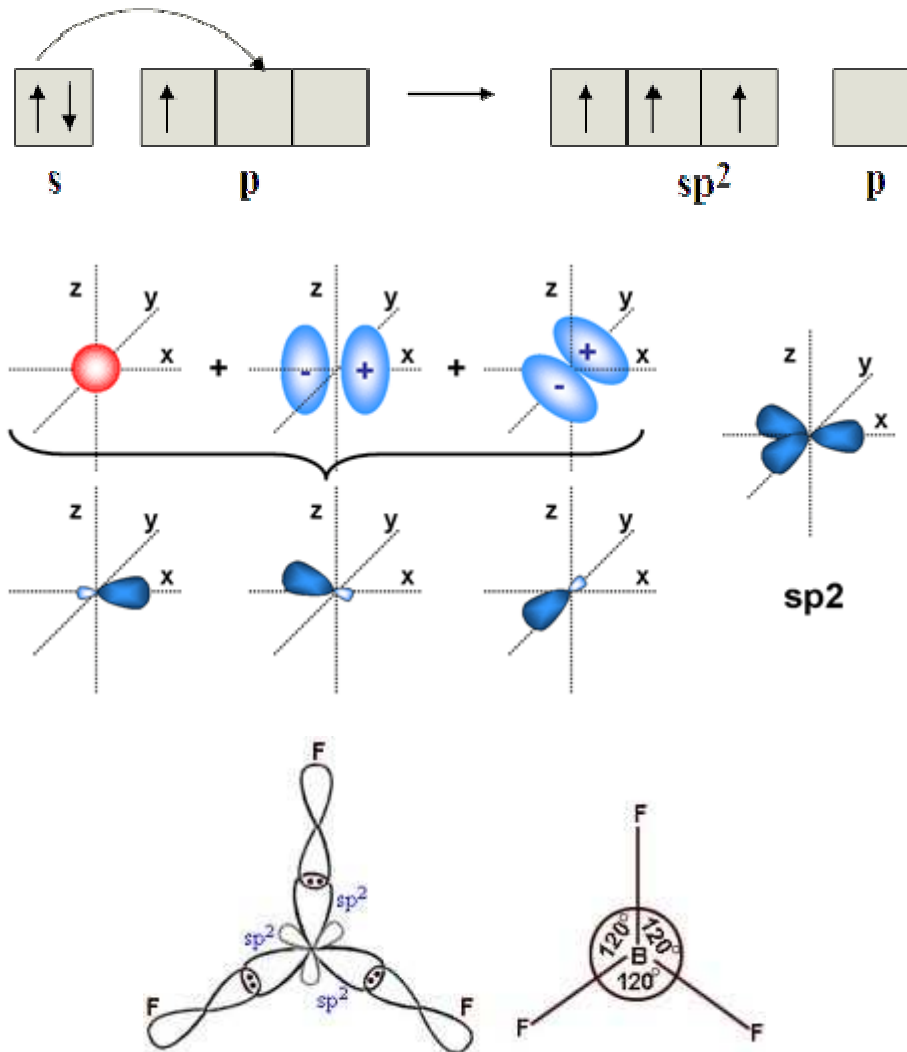


## Ejemplo: $\text{BF}_3$



La covalencia del boro es 1 y sólo podría combinar con un átomo.

Se produce la promoción electrónica de un  $e^-$  de  $s \rightarrow p$  y se forman 3 orbitales híbridos  $sp^2$  cada uno de los cuales solapa con un orbital  $p$  del flúor.



## Ejemplo: $\text{BeCl}_2$



No podría reaccionar puesto que la covalencia sería 0.

Se produce la promoción electrónica de un  $e^-$  de  $s \rightarrow p$  y se forman 2 orbitales híbridos  $sp$  los cuales solapan con orbitales  $p$  del cloro.

