

Teorías del enlace covalente

11

Índice

11.1 Teoría de enlace valencia (EV) y la hibridación de los orbitales

- Los temas centrales de la teoría EV
- Tipos de orbitales híbridos

11.2 La manera en que se traslapan los orbitales y los tipos de enlace covalente

- El tratamiento de la EV para los enlaces sencillos y múltiples
- Traslape de orbitales y rotación molecular

11.3 Teoría de orbitales moleculares (OM) y deslocalización de electrones

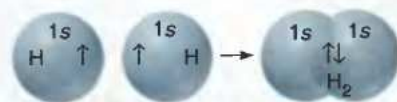
- Los temas centrales de la teoría OM
- Moléculas diatómicas homonucleares de los elementos del periodo 2
- Algunas moléculas diatómicas heteronucleares
- Las descripciones de OM para el ozono y el benceno

Figura: Representación visual de la teoría de enlace ¿Cómo es que las formas moleculares surgen a partir de la interacción de los átomos? Una teoría propone que durante el enlace se forman nuevos tipos de orbitales, como los que se muestran aquí para el fósforo, el átomo central del PCl_5 . En este capítulo, exploramos dos modelos que justifican la riqueza de las propiedades del enlace covalente.

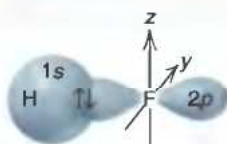
Conceptos y habilidades a revisar

Antes de estudiar este capítulo

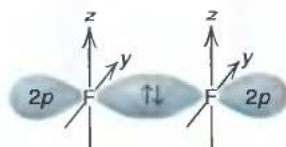
- las formas de los orbitales atómicos (sec. 7.4)
- el principio de exclusión de Pauli (sec. 8.2)
- la regla de Hund (sec. 8.3)
- escritura de estructuras de Lewis (sec. 10.1)
- la resonancia en el enlace covalente (sec. 10.1)
- las formas moleculares (sec. 10.3)
- la polaridad molecular (sec. 10.4)



A Hidrógeno, H_2



B Fluoruro de hidrógeno, HF



C Flúor, F_2

Figura 11.1 Traslape de orbitales y apareamiento de espines en tres moléculas diatómicas.

A, En la molécula de H_2 los dos orbitales $1s$ traslapados están ocupados por dos electrones $1s$ con espines opuestos. (Los electrones, representados como flechas, pasan más tiempo entre los núcleos pero se mueven a través de los orbitales traslapados.) **B**, Para maximizar el traslape en el HF, el orbital $1s$ parcialmente lleno del H y el $2p$ del F se traslapan a lo largo del eje del orbital $2p$ implicado en el enlace. (El orbital $2p_x$ se muestra en el enlace; los otros dos orbitales $2p$ del F no.) **C**, En la molécula de F_2 , el orbital parcialmente lleno $2p_x$ de uno de los F apunta su extremo hacia el extremo del orbital similar en el otro F para maximizar el traslape.

Todos los modelos científicos tienen limitaciones porque son simplificaciones de la realidad. El modelo de la RPECV explica las formas moleculares al suponer que los grupos de electrones tienden a minimizar sus repulsiones, lo que provoca que ocupen el mayor espacio posible alrededor del átomo central. Pero *no* dice cómo estas formas, que observamos experimentalmente, pueden explicarse a partir de las interacciones de orbitales atómicos. Después de todo, ninguno de los orbitales que estudiamos en el capítulo 7 están orientados hacia los vértices de un tetraedro o una bipirámide triangular (o trigonal), por mencionar sólo dos formas comunes de las moléculas. Más aún, aunque la forma de una molécula es crucial para muchos aspectos de su comportamiento, no ayuda a interpretar sus propiedades magnéticas o espectrales; sólo un entendimiento de sus orbitales y niveles de energía puede hacer eso.

Para comprender esos factores, un modelo mecánico-cuántico que ha resultado muy exitoso para explicar propiedades atómicas también, se aplica para entender las propiedades de las moléculas. En este capítulo discutimos dos teorías del enlace covalente que se basan en la mecánica cuántica. La teoría de enlace valencia (EV) explica las interacciones de los orbitales atómicos que sirven para crear enlaces covalentes y muestra cómo las formas moleculares observadas se justifican con base en estas interacciones. También aplicamos la teoría EV a la descripción de dos tipos de enlaces covalentes. La teoría de orbital molecular (OM) explica los niveles de energía molecular y las propiedades asociadas, al proponer la existencia de orbitales que se extienden sobre toda la molécula. Cada teoría complementa a la otra y es indispensable para la total comprensión del enlace covalente.

No se desanime por nuestra necesidad de más de un modelo para explicar las observaciones en un tema tan universal como el enlace químico. Lo que encontramos en cada ciencia es que un modelo explica un aspecto particular de un tema mejor que otro, y que se requieren varios modelos para explicar un intervalo más amplio de fenómenos.

11.1 Teoría de enlace valencia (EV) y la hibridación de los orbitales

¿Qué es el enlace covalente y qué características le dan sus fuerzas? Más importante aún, ¿cómo podemos explicar las formas moleculares que vemos a partir de las interacciones de los orbitales atómicos? El método más útil para contestar estas preguntas es la **teoría de enlace valencia (EV)**

Los temas centrales de la teoría EV

El principio básico de la teoría EV es que *el enlace covalente se forma cuando los orbitales de dos átomos se traslapan y son ocupados por un par de electrones que tienen la más alta probabilidad de localizarse entre los núcleos*. Tres temas centrales de la teoría EV que se derivan de este principio son:

1. *Espines opuestos de los pares de electrones*. Como indica el principio de exclusión (sección 8.2), el espacio formado por el traslape de orbitales *tiene una capacidad máxima para dos electrones que deben tener espines opuestos*. Por ejemplo, cuando se forma una molécula de H_2 , los dos electrones $1s$ de dos átomos de H ocupan los orbitales traslapados $1s$ y tienen espines opuestos (figura 11.1A).

2. *Máximo traslape de los orbitales enlazados*. La fuerza del enlace depende de la atracción de los núcleos por los electrones compartidos, así que *mientras mayor es el traslape de orbitales, más fuerte (más estable) es el enlace*. La extensión del traslape depende de la forma y dirección de los orbitales implicados. El orbital s es esférico, pero los orbitales p y d tienen mayor densidad electrónica en una dirección que en otra,

de tal manera que un enlace que involucre orbitales p o d tiende a orientarse en la dirección que maximice el traslape.

Por ejemplo, en el enlace HF, el orbital $1s$ del H se traslapa con el orbital $2p$ parcialmente lleno del F *a lo largo del eje más largo* de ese orbital (figura 11.1B). Cualquier otra dirección daría como resultado un menor traslape y, en consecuencia, un enlace más débil. De manera análoga, en el enlace F—F del F_2 , los dos orbitales $2p$ interactúan frente a frente, esto es, *a lo largo de los ejes largos* de los orbitales, para maximizar el traslape (figura 11.1C).

3. *Hibridación de orbitales atómicos.* Para explicar el enlace en moléculas diatómicas simples, como el HF, podemos representar el traslape directo de los orbitales s y p de los átomos aislados. Pero, ¿cómo explicar las formas moleculares que se observan en tantas moléculas e iones poliatómicos a través del traslape entre orbitales s esféricos, orbitales perpendiculares p en forma de pesas y orbitales d en forma de hojas de trébol?

Considere una molécula de metano compuesta de cuatro átomos de H enlazados a un átomo central de C. Un átomo de C solitario en el estado basal ($[He] 2s^2 2p^2$) tiene cuatro electrones de valencia, dos en el orbital $2s$ y uno en dos de los tres orbitales $2p$. Podríamos entender fácilmente cómo dos orbitales p parcialmente llenos de C podrían traslaparse con los orbitales $1s$ de dos átomos de H para formar *dos* enlaces C—H, con un ángulo de enlace H—C—H de 90° . Pero, ¿cómo pueden traslaparse estos orbitales para formar *cuatro* enlaces C—H idénticos con el ángulo de enlace de 109.5° que se observa en el metano?

Linus Pauling contestó preguntas como ésta al proponer que *los orbitales atómicos de valencia en la molécula son diferentes de aquéllos en los átomos aislados*. Cálculos de mecánica cuántica muestran que la mezcla matemática de ciertas combinaciones de orbitales en un átomo da como resultado *nuevos orbitales atómicos*. Las orientaciones espaciales de estos nuevos orbitales conducen a enlaces más estables, y son consistentes con las formas moleculares observadas. El proceso de combinación de orbitales se denomina **hibridación**, y a los nuevos orbitales atómicos se les conoce como **orbitales híbridos**. Dos puntos clave sobre el número y tipo de orbitales híbridos son:

- El *número* de orbitales híbridos obtenido *es igual* al número de orbitales atómicos combinados.
- El *tipo* de orbitales híbridos obtenidos *varía* de acuerdo con los tipos de orbitales atómicos combinados.

Puede imaginar la hibridación como un proceso en el cual se combinan orbitales atómicos, formándose orbitales híbridos que son ocupados por electrones con sus espines paralelos (regla de Hund) para crear enlaces estables. Sin embargo, tome en cuenta que la hibridación es un resultado obtenido matemáticamente a través de la mecánica cuántica que explica las formas moleculares que observamos.

Tipos de orbitales híbridos

Recuerde que postulamos la presencia de un cierto tipo de orbital híbrido *después* que observamos la forma de la molécula. Conforme explicamos los cinco tipos comunes de hibridación, note que la orientación espacial de cada tipo de orbital híbrido corresponde a uno de los cinco arreglos comunes de grupos de electrones predichos por la teoría RPECV.

Hibridación sp Cuando grupos de dos electrones rodean al átomo central, observamos una forma lineal; esto significa que los orbitales de enlace deben tener una orientación lineal. La teoría EV explica esto proponiendo que la combinación de dos orbitales *no equivalentes* de un átomo central, uno s y otro p , da lugar a dos **orbitales híbridos sp equivalentes**, que se encuentran a 180° entre sí, como se muestra en la página siguiente en la figura 11.2A. Observe la forma

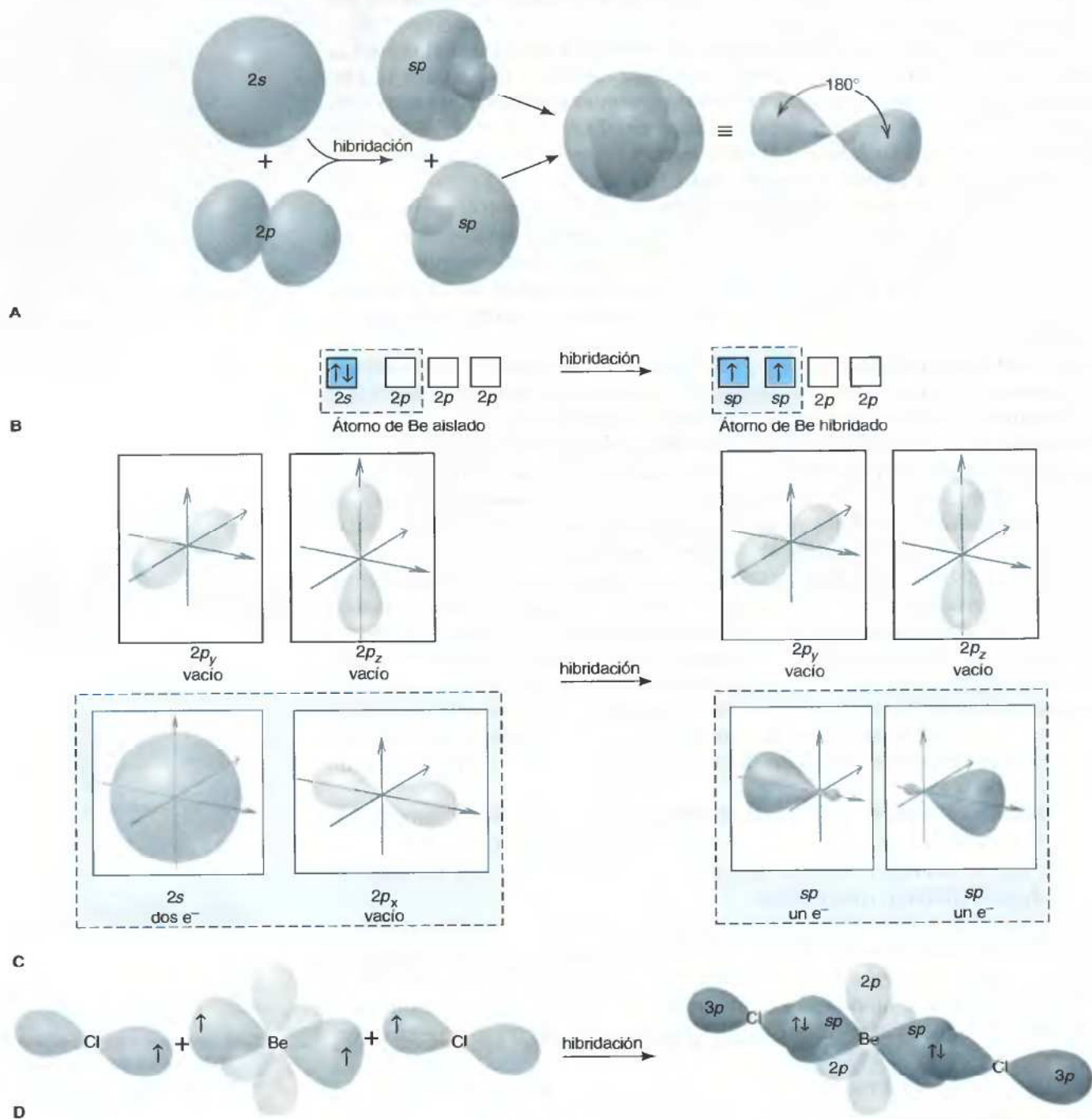


Figura 11.2 Los orbitales híbridos sp en el BeCl_2 gaseoso. **A**, Un orbital $2s$ y uno $2p$ se combinan para formar dos orbitales híbridos sp . (Se muestran uno sobre el otro y ligeramente en perspectiva para verlos más fácilmente.) Observe los lóbulos grandes y pequeños de los orbitales híbridos. En la molécula, los dos orbitales sp del Be se encuentran en direcciones opuestas. (Por claridad, a lo largo del texto se utilizarán los orbitales híbridos simplificados que se muestran del lado derecho, generalmente, sin el lóbulo pequeño.) **B**, El diagrama de casillas de orbitales para la hibridación en el Be ilustra que el orbital $2s$ y uno de los tres orbitales

$2p$ forman dos orbitales híbridos sp , y los otros dos orbitales $2p$ permanecen sin hibridar. Los electrones llenan parcialmente a los híbridos sp . Al formarse el enlace, cada orbital sp se llena por adición de un electrón del Cl (que no se muestra). **C**, El diagrama de casillas de orbitales se encuentra con contornos de orbitales en lugar de flechas correspondientes a electrones. **D**, El BeCl_2 se forma por traslape de los dos híbridos sp con los orbitales $3p$ de dos átomos de Cl; los dos orbitales $2p$ sin hibridar son perpendiculares a los híbridos sp . (Para hacerlo más accesible, solamente se muestra el orbital $3p$ de cada Cl que está presente en el enlace.)

del orbital híbrido: con un lóbulo pequeño y uno grande, es marcadamente diferente a las formas de los orbitales atómicos que se combinaron. La orientación de los orbitales híbridos extiende la densidad electrónica en dirección del enlace y minimiza las repulsiones entre los electrones que los ocupan. En consecuencia, *tanto la forma como la orientación maximizan el traslape con el orbital del otro átomo en el enlace.*

Por ejemplo, en el BeCl_2 gaseoso, se dice que el átomo de Be tiene una hibridación sp . La figura 11.2B a la D representa la hibridación del Be en BeCl_2 en términos de un diagrama tradicional de casillas de orbitales (B), un diagrama de casillas con contornos de orbitales (C), y la formación del enlace con el Cl (D). El orbital $2s$ y uno de los tres orbitales $2p$ del Be se combinan y forman dos orbitales sp . Éstos se traslapan con orbitales $3p$ de dos átomos de Cl, y los cuatro electrones de valencia —dos del Be y uno de cada Cl— ocupan los orbitales que se traslapan en pares, con espines opuestos. Los dos orbitales $2p$ del Be sin hibridar permanecen perpendiculares entre sí y al eje de los enlaces. En consecuencia, debido a la hibridación, el par de electrones $2s$ en el átomo aislado de Be se distribuye en dos orbitales sp , los cuales forman dos enlaces Be—Cl.

Hibridación sp^2 Para fundamentar el arreglo del grupo de electrones trigonal planar y las formas de las moléculas basadas en éste, introducimos la hibridación de un orbital s y dos p del átomo central, para dar tres orbitales híbridos que se orientan hacia los vértices de un triángulo equilátero, con sus ejes a 120° entre sí. A éstos se les denomina **orbitales híbridos sp^2** . Observe que, a diferencia de la notación utilizada al describir configuración electrónica, en este caso el superíndice se refiere al *número* de orbitales atómicos de un tipo dado que se hibridan, y *no* al número de electrones en el orbital: se combinaron un orbital s y dos p , por tanto tenemos s^1p^2 , o sp^2 .

La teoría EV propone que el átomo central de B en la molécula de BF_3 tiene una hibridación sp^2 . La figura 11.3 muestra los tres orbitales sp^2 en el plano trigonal, con el tercer orbital $2p$ sin hibridar y perpendicular a este plano. Cada orbital sp^2 se traslapa con el orbital $2p$ de un átomo de F, y los seis electrones de valencia —tres del B y uno de cada uno de los tres átomos de F— conforman los tres pares de enlace.

Para explicar otras formas moleculares dentro de un arreglo dado de grupos de electrones, postulamos que uno o más de los orbitales híbridos contiene pares libres (o solitarios). Por ejemplo, en el ozono (O_3) el átomo central O tiene una hibridación sp^2 y un par libre llena uno de sus tres orbitales sp^2 , de tal manera que el ozono tiene una forma molecular curva (o inclinada).

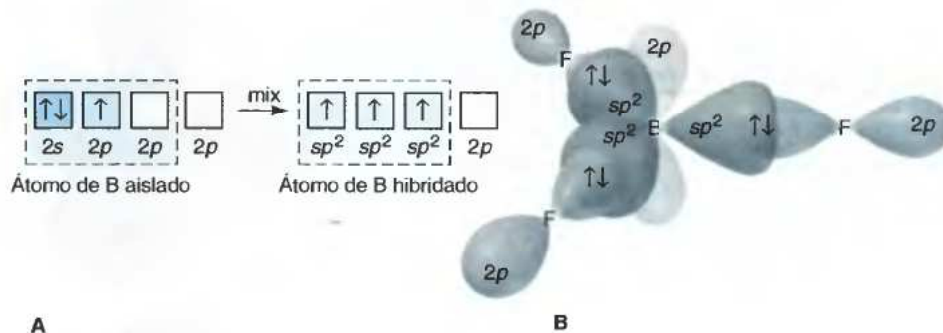


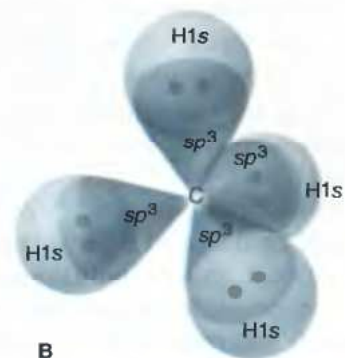
Figura 11.3 Los orbitales híbridos sp^2 en el BF_3 . **A**, El diagrama de cajas (o casillas) de orbitales muestra que el orbital $2s$ y dos de las tres orbitales $2p$ del átomo de boro se combinan para formar tres orbitales híbridos sp^2 . Tres electrones (mostrados como flechas hacia arriba) llenan parcialmente a los híbridos sp^2 . El tercer orbital $2p$ permanece vacío y sin hibridar. **B**, El BF_3 se forma por el traslape de orbitales $2p$ en tres átomos de F con los híbridos sp^2 . Al formarse el enlace, cada orbital sp^2 se llena por adición de un electrón del F (mostrados como flechas hacia abajo). Los tres híbridos sp^2 del B se encuentran a 120° entre sí, y su orbital $2p$ sin hibridar es perpendicular al plano trigonal de enlace.

Figura 11.4 Los orbitales híbridos sp^3 en el CH_4 .

A. El diagrama de cajas de orbitales muestra que el orbital $2s$ y los tres orbitales $2p$ del C se combinan para formar cuatro híbridos sp^3 . Los cuatro electrones de valencia del carbono llenan parcialmente los híbridos sp^3 . **B.** En el metano, los cuatro orbitales sp^3 del C apuntan hacia los vértices de un tetraedro, y se traslapan con los orbitales $1s$ de cuatro átomos de H. Cada orbital sp^3 se llena por la adición de un electrón del H (mostrados aquí como puntos).



A



B

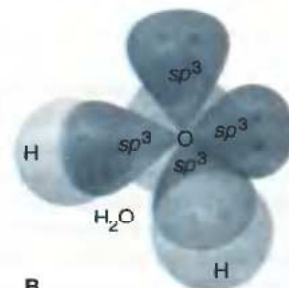
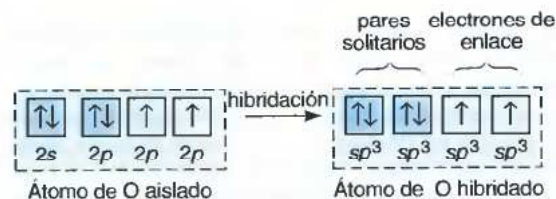
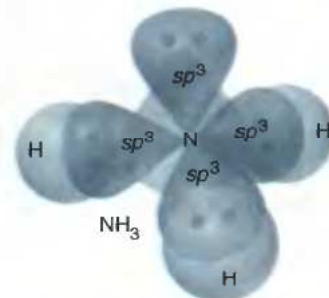
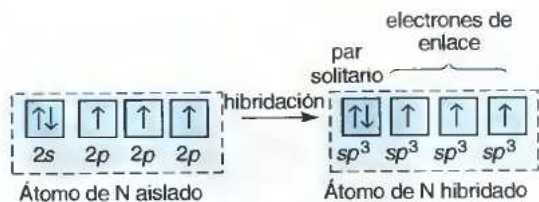
Hibridación sp^3 Ahora regresemos a la pregunta que hicimos antes sobre los orbitales del metano, misma que surge para cualquier especie con un arreglo tetraédrico de grupos de electrones. La teoría EV propone que el orbital s y los tres orbitales p del átomo central se combinan y forman cuatro **orbitales híbridos sp^3** , los cuales apuntan hacia los vértices de un tetraedro. Como se muestra en la figura 11.4, el átomo de C en el metano tiene hibridación sp^3 . Sus cuatro electrones de valencia llenan parcialmente los cuatro orbitales híbridos sp^3 , los cuales se traslapan con los orbitales $1s$ parcialmente llenos de los cuatro átomos de H y forman cuatro enlaces C—H.

La figura 11.5 muestra el enlace en moléculas que tienen las otras formas del arreglo tetraédrico. La forma piramidal trigonal del NH_3 surge cuando un par solitario llena uno de los cuatro orbitales sp^3 del N, y la forma angular del H_2O se genera cuando pares libres ocupan dos de los orbitales sp^3 del O.

Hibridación sp^3d Las formas de las moléculas con arreglos de grupos de electrones de bipiramidal trigonal u octaédrica se fundamentan por la teoría de EV a través de argumentos análogos. El único punto adicional es que tales moléculas tienen átomos centrales del periodo 3 o mayor, de tal manera que para formar los orbitales híbridos se combinan orbitales atómicos d , así como s y p .

Figura 11.5 Los orbitales híbridos sp^3 en NH_3 y H_2O .

A. El diagrama de cajas de orbitales muestra la hibridación sp^3 , como en CH_4 . En el NH_3 (arriba), uno de los orbitales sp^3 está ocupado por un par libre. En H_2O (abajo), dos de los orbitales sp^3 se llenan con pares libres. **B.** Los diagramas de contornos muestran la orientación tetraédrica de los orbitales sp^3 y el traslape de los átomos de H enlazados. Cada orbital sp^3 parcialmente lleno se ocupa por la adición de un electrón del H. (Los pares compartidos y los pares libres se muestran como puntos.)



A

B

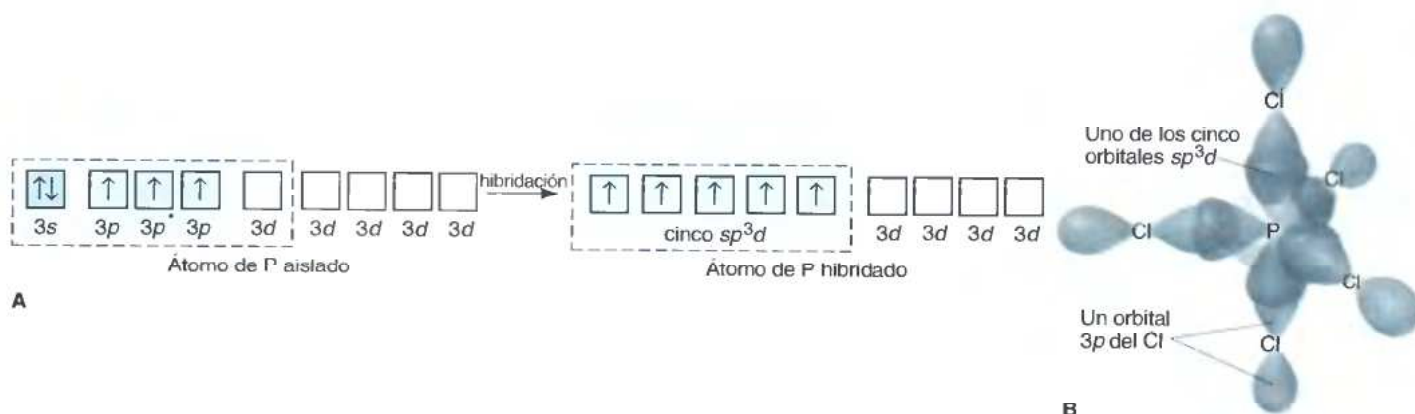


Figura 11.6 Los orbitales híbridos sp^3d en PCl_5 . **A**, El diagrama de cajas de orbitales muestra que un orbital $3s$, tres $3p$ y uno de los cinco orbitales $3d$ del P se hibridizan para formar cinco orbitales sp^3d parcialmente llenos. Cuatro orbitales $3d$ permanecen sin hibridar y vacíos. **B**, La molécula de PCl_5 en forma de bipirámide

trigonal se forma por el traslape de un orbital $3p$ de los cinco átomos de Cl con los orbitales híbridos sp^3d del P. (Los orbitales vacíos no hibridados no se muestran.) Al formarse los enlaces, cada orbital sp^3d se llena por la adición de un electrón del Cl. (Los cinco pares de enlace no se muestran.)

Por ejemplo, para fundamentar la forma de bipiramidal trigonal de la molécula de PCl_5 , la teoría EV propone que un orbital $3s$, los tres $3p$ y uno de los cinco orbitales $3d$ del átomo central de P, se combinan y forman cinco **orbitales híbridos sp^3d** , los cuales apuntan hacia los vértices de una bipirámide trigonal. Cada orbital híbrido se traslapa con un orbital $3p$ de un átomo de Cl, y los cinco electrones de valencia del P, junto con uno de cada uno de los cinco átomos de Cl, se aparean para formar cinco enlaces P—Cl, como se muestra en la figura 11.6. Otras formas en este arreglo de grupos de electrones tienen pares libres en uno o más de los orbitales sp^3d del átomo central.

Hibridación sp^3d^2 Para fundamentar la forma del SF_6 , el modelo EV propone que un orbital $3s$, los tres $3p$, y dos de los cinco orbitales $3d$ del átomo central de S se combinan y forman seis **orbitales híbridos sp^3d^2** , los cuales apuntan hacia los vértices de un octaedro. Cada orbital híbrido se traslapa con un orbital $2p$ de un átomo de F, y los seis electrones de valencia del S, junto con uno de cada uno de los seis átomos de F, se aparean para formar seis enlaces S—F (figura 11.7). Las formas de piramidal cuadrada y de cuadrado plano tienen pares libres en uno o dos de los orbitales sp^3d^2 del átomo central, respectivamente.

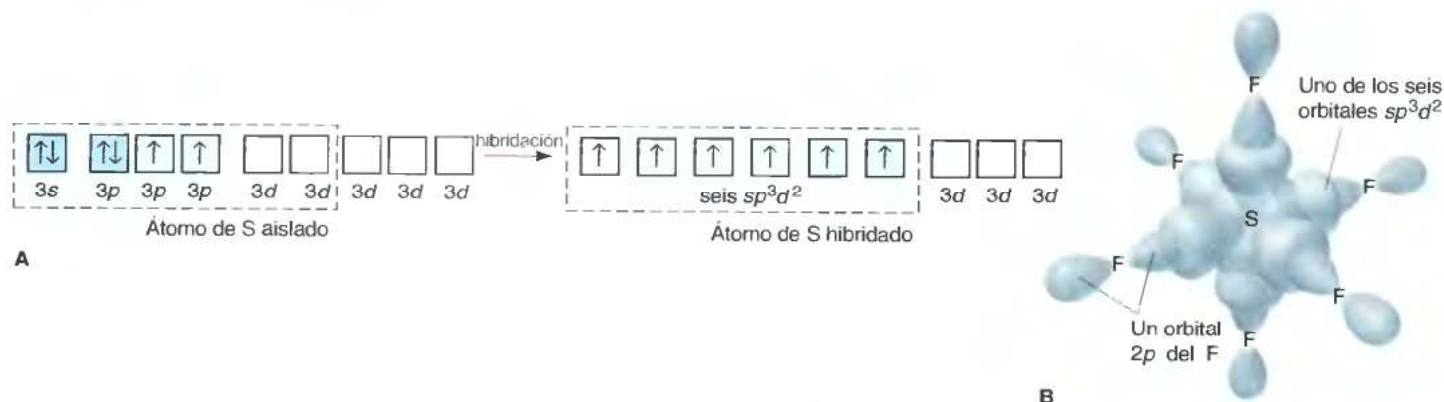







Figura 11.7 Los orbitales híbridos sp^3d^2 en el SF_6 . **A**, El diagrama de cajas de orbitales muestra que un orbital $3s$, tres $3p$ y dos orbitales $3d$ del S se hibridan para formar seis orbitales sp^3d^2 parcialmente llenos. Tres orbitales $3d$ permanecen sin hibridar y vacíos. **B**, La molécula octaédrica de SF_6 se forma del traslape de un

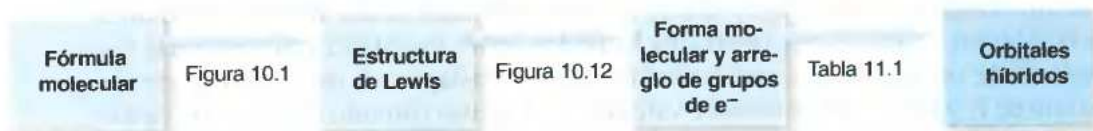
orbital $2p$ de los seis átomos de F con los orbitales sp^3d^2 del S (los orbitales $3d$ vacíos y sin hibridar no se muestran). En la formación de los enlaces, cada orbital sp^3d^2 se llena por la adición de un electrón del F. (Los seis pares de enlace no se muestran.)

Tabla 11.1 Composición y orientación de los orbitales híbridos

	Lineal	Trigonal planar	Tetraédrica	Bipiramidal trigonal	Octaédrica
Orbitales atómicos combinados	uno <i>s</i> uno <i>p</i>	uno <i>s</i> dos <i>p</i>	uno <i>s</i> tres <i>p</i>	uno <i>s</i> tres <i>p</i> uno <i>d</i>	uno <i>s</i> tres <i>p</i> dos <i>d</i>
Orbitales híbridos formados	dos <i>sp</i>	tres <i>sp</i> ²	cuatro <i>sp</i> ³	cinco <i>sp</i> ³ <i>d</i>	seis <i>sp</i> ³ <i>d</i> ²
Orbitales que quedan sin hibridar	dos <i>p</i>	uno <i>p</i>	ninguno	cuatro <i>d</i>	tres <i>d</i>
Orientación					

La tabla 11.1 resume el número y los tipos de orbitales atómicos que se combinan para obtener los cinco tipos de orbitales atómicos híbridos. Una vez más, observe las similitudes entre las orientaciones de los orbitales híbridos propuestos por la teoría EV y las formas predichas por la teoría RPECV (véase figura 10.5, p. 382). La figura 11.8 muestra las etapas conceptuales desde la fórmula molecular hasta el postulado de los orbitales híbridos en la molécula, y el siguiente ejemplo detalla el fin de este proceso.

Figura 11.8 Los pasos conceptuales desde la fórmula molecular hasta los orbitales híbridos usados en el enlace. (véanse figuras 10.1, página 369, y 10.12, página 387.)



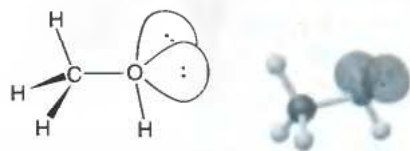
Ejemplo 11.1 Postulación de los orbitales híbridos en una molécula

PROBLEMA Use diagramas parciales de orbitales para describir cómo la combinación de orbitales atómicos en el átomo central conduce a los orbitales híbridos en cada uno de los siguientes casos:

a) Metanol, CH₃OH b) Tetrafluoruro de azufre, SF₄

PLAN Dibujamos la forma molecular y encontramos el número y arreglo de grupos de electrones alrededor de los átomos centrales. De esto, postulamos el tipo de orbitales híbridos implicados. Luego, escribimos el diagrama parcial de orbitales para cada átomo central antes y después de la hibridación de los orbitales.

SOLUCIÓN a) Para el CH₃OH. El arreglo de los grupos de electrones es tetraédrico alrededor de los átomos de C y O. Por tanto, cada átomo central tiene hibridación *sp*³. El átomo de C tienen cuatro orbitales *sp*³ parcialmente llenos:

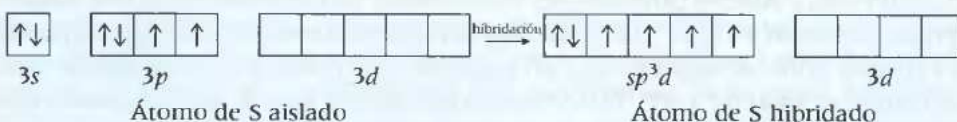


El átomo de O tiene dos orbitales sp^3 parcialmente llenos y dos más ocupados por pares libres:



En la formación del enlace, cada orbital parcialmente lleno de C u O se llena con el segundo electrón, que en este caso proviene del H.

b) Para el SF_4 : La forma molecular es distorsionada, la cual está basada en el arreglo de grupos de electrones de bipirámide trigonal. En consecuencia, el átomo central de S está rodeado por cinco grupos de electrones, lo que implica hibridación sp^3d . Se combinan un orbital $3s$, tres $3p$ y un $3d$. Un orbital híbrido está ocupado por un par libre y cuatro están parcialmente llenos. Cuatro orbitales $3d$ sin hibridar permanecen vacíos:



Al formarse los enlaces, cada orbital parcialmente lleno del S se ocupa con el segundo electrón, que proviene de átomos de F.

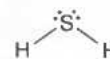
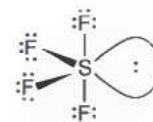
Problema de aplicación 11.1 Use diagramas parciales de orbitales que muestren cómo los orbitales atómicos de átomos centrales conducen a los orbitales híbridos en a) fluoruro de berilio, BeF_2 ; b) tetracloruro de silicio, $SiCl_4$; c) tetrafluoruro de xenón, XeF_4 .

Cuándo puede no aplicarse el concepto de hibridación Empleamos las teorías RPECV y EV *siempre que sea necesario* fundamentar una forma molecular observada en términos de orbitales atómicos. Sin embargo, en algunos casos las teorías pueden no ser necesarias. Considere la estructura de Lewis y la forma molecular del H_2S (véase margen). Con base en la teoría RPECV, podríamos predecir que, como en el H_2O , los cuatro grupos de electrones alrededor del H_2S apuntan a los vértices de un tetraedro, y que los dos pares solitarios de electrones comprimen un poco el ángulo $H-S-H$ por debajo del ángulo ideal de 109.5° . A partir de la teoría EV, podríamos proponer que los orbitales $3s$ y $3p$ del átomo central de S se combinan y forman cuatro híbridos sp^3 , dos de los cuales están ocupados por pares libres; mientras que los otros dos se traslapan con los orbitales $1s$ de dos átomos de H, y están ocupados por pares de enlace.

El problema es que la observación *no* apoya estos argumentos. De hecho, la molécula de H_2S tiene un ángulo de enlace de 92° , cercano al ángulo de 90° esperado entre orbitales p perpendiculares *sin hibridar*. Se encuentran ángulos similares en los otros hidruros del grupo 6A(16) y también en los hidruros mayores del grupo 5A(15). No tiene sentido aplicar una teoría cuando los hechos no lo justifican. En el caso del H_2S y los otros hidruros de no metales, no se aplican ni la teoría RPECV ni el concepto de hibridación. Es importante recordar que factores reales, como longitud de enlace, tamaño atómico y repulsiones electrónicas, influyen sobre la forma de las moléculas. Aparentemente, con estos átomos centrales de mayor tamaño y sus enlaces más largos al H, disminuyen el apiñamiento y la repulsión entre electrones, y el traslape simple de orbitales atómicos sin hibridar racionaliza perfectamente las formas observadas.

Resumen de la sección

La teoría EV explica que un enlace covalente se forma cuando dos orbitales atómicos se traslapan. El enlace contiene dos electrones con espines apareados (opuestos). La hibridación de orbitales nos permite explicar cómo se combinan los orbitales en átomos aislados y cambian sus características durante la formación de enlaces. Con base en las formas moleculares observadas (y los arreglos de grupos de elec-



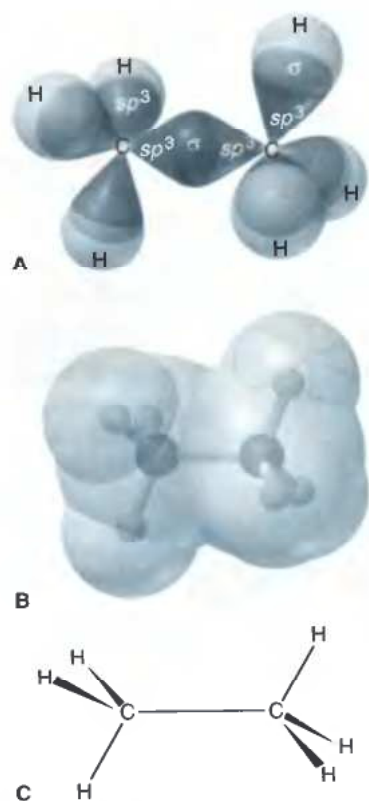


Figura 11.9 Los enlaces σ en el etano (C_2H_6). **A**, Ambos átomos de C en el etano tienen hibridación sp^3 . Un orbital sp^3 de cada C se traslapa para formar un enlace σ C—C. Los otros orbitales sp^3 se traslapan con los orbitales $1s$ de los seis átomos de H para formar seis enlaces σ C—H. **B**, La densidad electrónica está distribuida de manera relativamente homogénea entre los enlaces σ de la molécula de etano. **C**, Dibujo con enlaces representados por líneas.

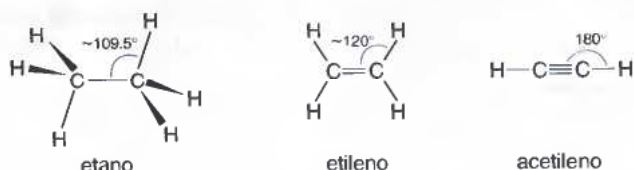
trones relacionados), postulamos el tipo de orbital híbrido necesario. En ciertos casos, no es necesario invocar en lo absoluto la hibridación.

11.2 La manera en que se traslapan los orbitales y los tipos de enlace covalente

En esta sección, utilizamos la teoría EV para centrarnos en la *manera* en que los orbitales se traslapan —frente a frente o lado a lado— para entender los tipos de enlace covalente y la composición detallada de los enlaces múltiples.

El tratamiento de la EV para los enlaces sencillos y múltiples

El modelo RPECV predice, y las mediciones verifican, formas diferentes para las tres moléculas orgánicas de dos átomos de carbono etano (C_2H_6), etileno (C_2H_4) y acetileno (C_2H_2). Ambos carbonos del etano tienen forma tetraédrica, con ángulos de enlace cercanos a 109.5° . Los carbonos del etileno tienen forma trigonal planar, con el enlace doble actuando como un grupo de electrones, y con ángulos de enlace cercanos al ideal de 120° . El acetileno tiene forma lineal, con el enlace triple actuando como un grupo de electrones, y con ángulos de enlace de 180° .



Una mirada detallada a los enlaces descubre que hay dos tipos de traslape de orbitales:

1. *Traslape extremo a extremo y enlace sigma (σ)*. La figura 11.9 muestra que ambos átomos de C en el etano tienen hibridación sp^3 . El enlace C—C supone traslape de un orbital sp^3 de cada C, y los seis enlaces C—H implican el traslape de un orbital sp^3 del C con un orbital $1s$ del H. Los enlaces en el etano son como los descritos hasta ahora en esta sección. Por ejemplo, veamos de cerca el enlace C—C; comprende el traslape del extremo de un orbital con el extremo del otro. El enlace que resulta de tal traslape *extremo a extremo* se denomina **enlace sigma (σ)**. Éste tiene *la mayor densidad electrónica a lo largo del eje del enlace* (una línea imaginaria que une ambos núcleos) y tiene la forma de una elipse que se ha rotado alrededor de su eje mayor (algo así como la pelota de fútbol americano). Todos los enlaces sencillos, formados por cualquier combinación de orbitales híbridos que se traslapen, *s* o *p*, tienen su densidad electrónica concentrada a lo largo del eje del enlace y son, por tanto, enlaces σ .

2. *Traslape lado a lado y enlace pi (π)*. Una mirada cuidadosa a la figura 11.10 revela la naturaleza doble del enlace carbono-carbono en el etileno. Aquí, cada átomo de C tiene hibridación sp^2 . Cada uno de los cuatro electrones de valencia del

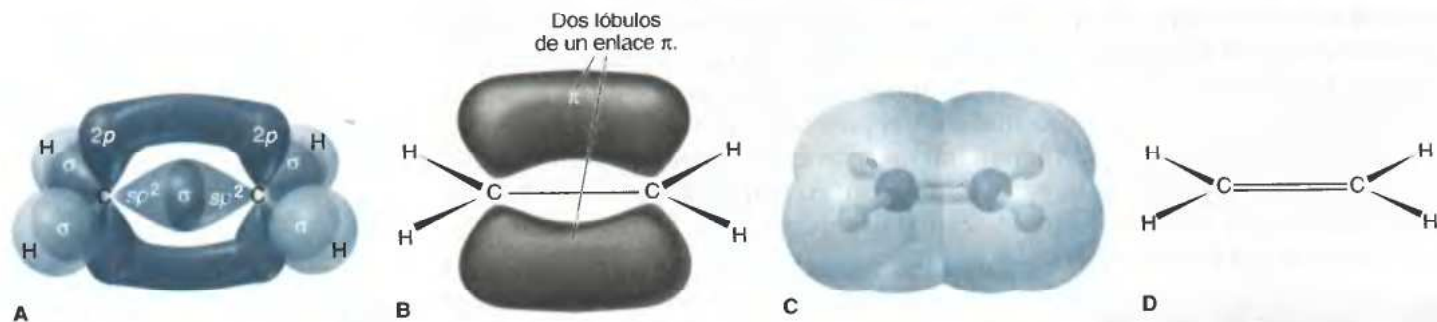


Figura 11.10 Los enlaces σ y π del etileno (C_2H_4). **A**, Los dos átomos de C tienen hibridación sp^2 y forman un enlace σ C—C y cuatro enlaces σ C—H. Sus orbitales $2p$ parcialmente llenos y sin hibridar se encuentran perpendiculares al plano de los enlaces σ , y se muestra cómo se traslapan lado a lado. **B**, Las dos regiones que se traslapan constituyen un enlace π , el cual está ocupado por dos

electrones. Los enlaces σ se ilustran representados por líneas. Los dos lóbulos de un enlace π se encuentran arriba y debajo de la línea del enlace σ C—C. **C**, Con cuatro electrones —un enlace σ y uno π — entre los átomos de C, la densidad electrónica (sombreado rojo) es mayor. **D**, Dibujo con los enlaces representados por líneas. (Véase sección a color, pág. 16.)

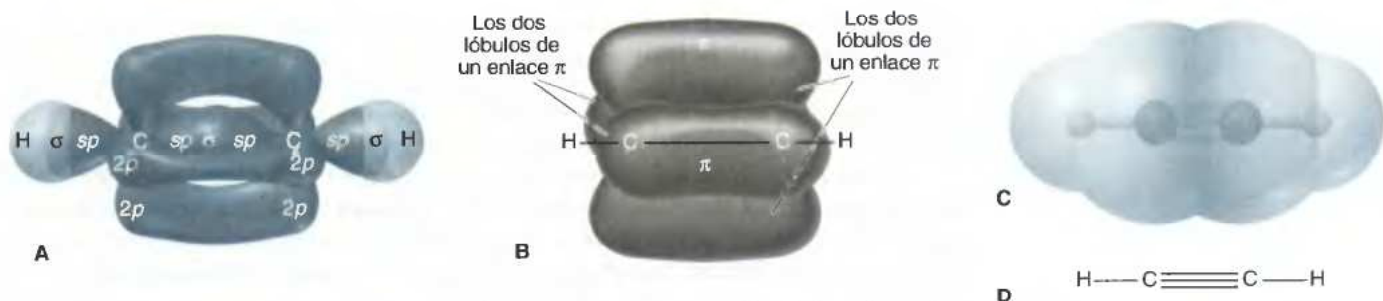


Figura 11.11 Los enlaces σ y π del acetileno (C_2H_2).

A, Los enlaces σ del acetileno constan de un orbital sp de cada C traslapándose para formar un enlace σ C—C, y el otro orbital sp de cada C se traslapa con un orbital s de un átomo de H, para formar dos enlaces σ C—H. Quedan dos orbitales $2p$ sin hibridar en cada C, los cuales se muestran traslapándose. **B**, Se generan dos enlaces π por traslape lado a lado. Para describir la formación de los enlaces π , uno de ellos se ilustra con sus lóbulos por arriba y por debajo del enlace σ C—C, y el otro, se muestra con sus lóbulos al frente y por detrás, con los enlaces σ representados por líneas. Sin embargo, en la molécula real las nubes de electrones de los dos enlaces π coinciden parcialmente, lo que da como resultado la molécula con la simetría de un cilindro. **C**, Los seis electrones —un enlace σ y dos enlaces π — crean una densidad electrónica aún mayor entre los átomos de C. **D**, Dibujo con enlaces representados por líneas.

C llenan parcialmente sus tres orbitales sp^2 y su orbital $2p$ no hibridado, el cual se encuentra perpendicular al plano sp^2 . Dos orbitales sp^2 de cada C forman enlaces σ C—H por traslape con los orbitales $1s$ de los dos átomos de H. El tercer orbital sp^2 forma un enlace σ C—C con un orbital sp^2 del otro C, porque su orientación permite el traslape extremo a extremo.

Al estar los átomos de C unidos por el enlace σ , cercanos entre sí, los orbitales $2p$ parcialmente llenos y sin hibridar están lo suficientemente cerca como para traslaparse *lado a lado*. Tal traslape forma otro tipo de enlace covalente denominado **enlace pi (π)**. Éste tiene *dos regiones de densidad electrónica*, una por arriba y otra por debajo del eje del enlace σ . *Un enlace π contiene dos electrones que se mueven por ambas regiones del enlace*. Un enlace doble siempre consiste de un enlace σ y otro enlace π . Como se muestra en la figura 11.10, el enlace doble incrementa la densidad electrónica entre los átomos de C.

Ahora podemos contestar una pregunta que quedó pendiente en nuestra discusión de la teoría RPECV en el capítulo 10: ¿Por qué los pares de electrones en un enlace doble actúan como un grupo de electrones; esto es, por qué no hay repulsión entre ellos? La respuesta es que cada par de electrones ocupa un orbital diferente, una región específica de densidad electrónica, de tal manera que la repulsión se reduce.

Un enlace triple, como el $C\equiv C$ en el acetileno, *consiste en un enlace σ y dos enlaces π* (figura 11.11). Para maximizar el traslape en una forma lineal, un orbital s y uno p en *cada* átomo de C forman dos híbridos sp , y dos orbitales $2p$ permanecen sin hibridar. Los cuatro electrones de valencia llenan parcialmente los cuatro orbitales. Cada C usa uno de sus orbitales sp para formar un enlace σ con un átomo de H y usa el otro para formar el enlace σ C—C. El traslape lado a lado de un par de orbitales $2p$ da un enlace π , con la densidad electrónica por arriba y abajo del enlace σ . El traslape lado a lado del otro par de orbitales $2p$ nos da el otro enlace π , a 90° del primero, con la densidad electrónica por enfrente y detrás del enlace σ . El resultado final es la molécula $H-C\equiv C-H$, con la simetría de un cilindro. Note que la densidad electrónica entre los átomos de C, creada por los seis electrones de enlace, es todavía mayor.

El grado de traslape influye sobre la fuerza del enlace. Debido a que el traslape lado a lado no es tan extenso como el traslape extremo a extremo, se espera que un enlace π sea más débil que un enlace σ y, en consecuencia, la fuerza de un enlace doble debe ser menor que el doble de la fuerza de un enlace sencillo. En efecto, esta expectativa se confirma entre los enlaces carbono-carbono (véase problema 11.42). Sin embargo, muchos factores, como repulsión entre pares de electrones solitarios, polaridades de enlace, y otras contribuciones electrostáticas nublan esta relación para los enlaces de otros elementos. Por tanto, como una aproximación burda, es prudente decir que un enlace doble es más o menos dos veces más fuerte que un enlace sencillo, y que un enlace triple es aproximadamente tres veces más fuerte.

Ejemplo 11.2 Descripción del enlace en moléculas con enlace múltiple

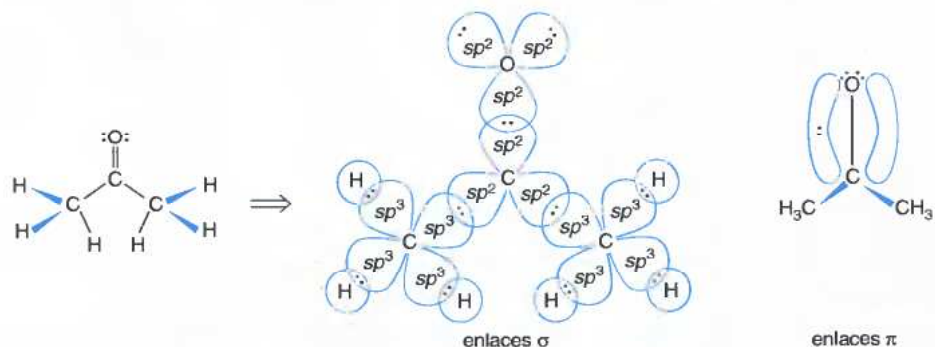
PROBLEMA Describir los tipos de enlaces y orbitales en la acetona, $(CH_3)_2CO$.

PLAN Remitiéndonos al ejemplo 11.1, observamos las formas alrededor de cada átomo para postular los orbitales híbridos usados, y poniendo especial atención en el enlace múltiple del enlace C=O.

SOLUCIÓN En el ejemplo 10.9, determinamos que las formas de los tres átomos centrales de la acetona es tetraédrica para los C de los dos grupos CH_3 (metilo) y trigonal planar para

el carbono intermedio. En consecuencia, el C central tiene tres orbitales sp^2 y un orbital p sin hibridar. Cada uno de los dos C de los metilos tiene cuatro orbitales sp^3 . Tres de estos orbitales sp^3 se traslapan con los orbitales $1s$ de los átomos de H para formar enlaces σ ; el cuarto se traslapa con un orbital sp^2 del átomo de C central. En consecuencia, dos de los tres orbitales sp^2 de este carbono forman enlaces σ con los átomos de C terminales.

El átomo de O también tiene hibridación sp^2 y un orbital p no hibridado listo para formar un enlace π ; dos de sus orbitales sp^2 contienen pares libres, y el tercero forma un enlace σ con el tercer orbital sp^2 del C central. Los orbitales p parcialmente llenos y sin hibridar en C y O forman un enlace π . Los enlaces σ y π constituyen el enlace $C=O$.



COMENTARIO Debido a que la forma molecular es nuestra guía para los orbitales usados en el enlace, no podemos saber de manera directa si un átomo terminal, como el átomo de O en la acetona, presenta hibridación. Después de todo, podría usar dos orbitales p perpendiculares para los enlaces σ y π con el C, y dejar los otros orbitales p y s para contener a los dos pares libres. Sin embargo, un par libre en un orbital s incrementaría las repulsiones al tenerse electrones adicionales parcialmente localizados en la región de enlace; el tener al par libre en un orbital sp^2 , lejos del enlace $C=O$ evita esto. Además, se conocen algunos compuestos en los cuales el O de un grupo $C=O$ está enlazado a otro átomo, y en estos casos el ángulo de enlace sugiere que el oxígeno tiene una hibridación sp^2 .

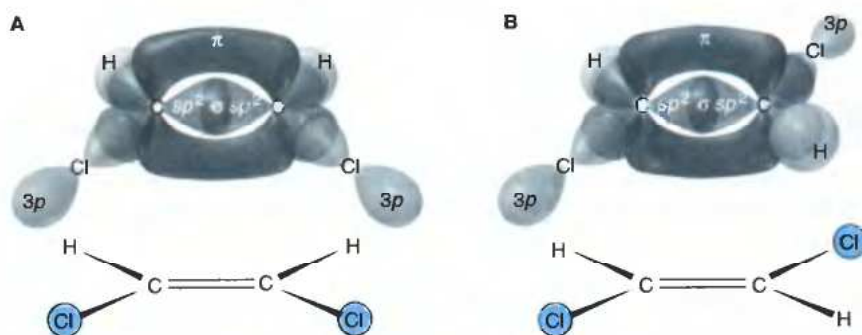
Problema de aplicación 11.2 Describa los tipos de enlace y los orbitales en: a) cianuro de hidrógeno, HCN, y b) dióxido de carbono, CO_2 .

Traslape de orbitales y rotación molecular

El tipo de enlace influye sobre la habilidad de una parte de una molécula para rotar con respecto a otra parte. Un enlace σ permite la rotación libre de los átomos, uno con respecto al otro, porque el grado de traslape no se ve afectado. Si pudiera sostener un grupo CH_3 de la molécula de etano, el otro grupo CH_3 podría girar como un molinillo sin afectar el traslape del enlace $\sigma C-C$.

Sin embargo, los orbitales p deben ser paralelos para poder llevar a cabo el traslape lado a lado, de tal manera que un enlace π restringe la rotación. Si rotar un grupo CH_2 en el etileno con respecto al otro disminuye el traslape lado a lado y rompe el enlace π . Ahora puede darse cuenta de por qué es posible que existan por separado estructuras *cis* y *trans* en moléculas con enlaces dobles, como el 1,2-dicloroetileno (sección 10.4). Como se muestra en la figura 11.12, el enlace π permite dos arreglos diferentes de átomos alrededor de los dos átomos de C, lo que puede tener un gran efecto

Figura 11.12 Rotación restringida de moléculas con enlaces π . A, El *cis*- y B, el *trans*-1,2-dicloroetileno existen como dos moléculas distintas debido a que el enlace π entre los átomos de C restringe la rotación y mantiene dos posiciones diferentes de los átomos de H y Cl.



en la polaridad molecular (véase p. 393). (La rotación alrededor de un enlace triple no tiene sentido: porque cada C unido por un enlace triple está unido solamente a otro grupo, y no puede haber diferencias en sus posiciones relativas.)

Resumen de la sección

El traslape extremo a extremo de orbitales atómicos forma un enlace σ y permite la rotación libre de los átomos. El traslape lado a lado forma un enlace π , el cual restringe la rotación. Un enlace múltiple consiste de un enlace σ y un enlace π (enlace doble) o dos enlaces π (enlace triple). Los enlaces múltiples tienen una mayor densidad electrónica que los enlaces sencillos.

11.3 Teoría de orbitales moleculares (OM) y deslocalización de electrones

Los científicos escogen el modelo que les permita contestar una pregunta en particular. Si la pregunta concierne a la forma, los químicos eligen el modelo RPECV, seguido por análisis de orbitales híbridos con la teoría EV. Pero esta teoría no explica de manera adecuada las propiedades magnéticas o espectrales de las moléculas, y subestima la importancia de la deslocalización de electrones. Para lidiar con estos fenómenos, que involucran los niveles energéticos de una molécula, los químicos utilizan la **teoría de orbitales moleculares (OM)**.

En la teoría EV, una molécula se representa como un grupo de átomos enlazados entre sí por medio de traslape *localizado* de los orbitales atómicos de la capa de valencia. En la teoría OM, una molécula se representa como una colección de núcleos con los orbitales que contienen a los electrones *deslocalizados*, sobre toda la molécula. El modelo OM es un tratamiento mecánico cuántico de las moléculas, análogo al utilizado para átomos individuales que se discutió en el capítulo 8. De la misma manera en que los átomos tienen orbitales atómicos (OA) de una energía y forma dadas, y que están ocupados por los electrones del átomo, las moléculas tienen **orbitales moleculares (OM)** de una energía y forma dadas, y que están ocupados por los electrones de la molécula. A pesar de la gran utilidad de la teoría OM, tiene también una desventaja: los orbitales moleculares son más difíciles de visualizar que las representaciones sencillas de la teoría RPECV o que los orbitales híbridos de la teoría EV.

Los temas centrales de la teoría OM

Varias ideas clave de la teoría OM aparecen en la descripción de la molécula de hidrógeno y otras especies simples. Estas ideas incluyen la formación de OM, su energía y forma, y cómo se llenan con electrones.

Formación de orbitales moleculares Debido a que el movimiento de los electrones es tan complejo, es necesario hacer uso de aproximaciones para resolver la ecuación de Schrödinger para cualquier átomo con más de un electrón. Surgen complicaciones similares aun con el H_2 , la molécula más simple, de tal manera que se requiere de aproximaciones para obtener las propiedades de los OM. La aproximación más común *combina* matemáticamente (suma o sustrae) los orbitales atómicos (funciones de onda atómicas) de los átomos cercanos, para formar orbitales moleculares (funciones de onda moleculares).

Cuando dos núcleos de H se encuentran cercanos entre sí, como en H_2 , sus OA se traslapan. Los dos modos de combinación de los OA son:

- *Sumar las funciones de onda entre sí.* Esta combinación forma un **OM de enlace**, el cual tiene una *región de alta densidad electrónica entre los núcleos*. El traslape aditivo es análogo al traslape de dos ondas de luz que se refuerzan entre sí y hacen que la onda resultante sea más brillante. Para las ondas de los electrones, el traslape *incrementa* la probabilidad de que los electrones se encuentren entre los núcleos (figura 11.13A).
- *Sustraer las funciones de onda entre sí.* Esta combinación forma un **OM de antienlace**, el cual tiene *un nodo entre los núcleos, una región de densidad electró-*

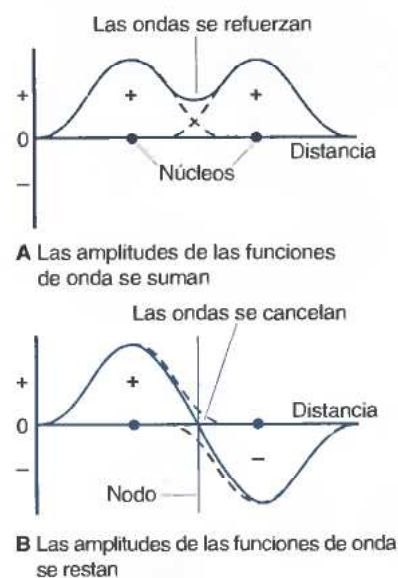


Figura 11.13 Una analogía entre las ondas de luz y las funciones de onda atómicas.

Cuando las ondas de luz sufren de interferencia, sus amplitudes pueden sumarse o sustraerse entre sí.

A, Cuando las amplitudes de las funciones de onda atómicas (*líneas discontinuas*) se suman, resulta un orbital molecular de enlace, y la densidad electrónica (*línea roja*) entre los núcleos se incrementa. **B**, A la inversa, cuando las amplitudes de la función de onda se sustraen, se forma un OM de antienlace, el cual tiene un nodo (región con densidad electrónica cero) entre los núcleos. (Véase sección a color, pág. 16.)

nica cero (figura 11.13B). El traslape sustractivo es análogo a dos ondas de luz que se cancelan entre sí, de tal manera que la luz desaparece. Con las ondas de los electrones, la probabilidad de que los electrones ocupen el espacio entre los núcleos *disminuye* a cero.

Las dos combinaciones posibles para los átomos de hidrógeno H_A y H_B son

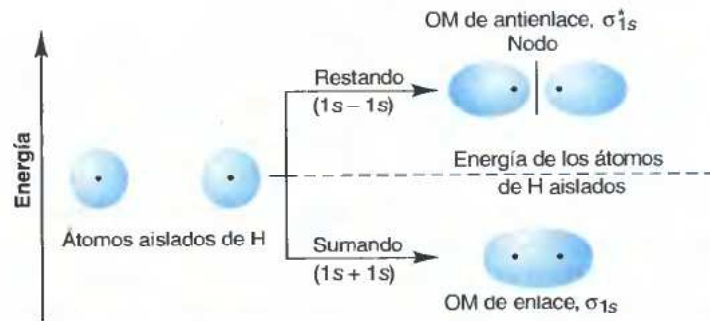
OA de H_A + OA de H_B = OM de enlace de H_2 (más densidad de e^- entre los núcleos)

OA de H_A - OA de H_B = OM de antienlace de H_2 (menor densidad de e^- entre los núcleos)

Observe que *el número de OA combinados siempre equivale al número de OM formados*: dos orbitales atómicos de H se combinan para formar dos orbitales moleculares de H_2 .

Energía y forma de los orbitales moleculares de H_2 El OM de enlace tiene menor energía y el OM de antienlace, mayor energía que los OA que se combinaron para formarlos. Examinemos la figura 11.14 para ver por qué esto es así.

Figura 11.14 Contornos y energías de los orbitales moleculares (OM) de enlace y antienlace en el H_2 . Cuando dos orbitales atómicos (OA) 1s de H se combinan, forman dos OM de H_2 . El OM de enlace (σ_{1s}) se forma por la adición de los OA y tiene una energía menor a la de los OA, porque la mayor parte de su densidad electrónica se encuentra *entre* los núcleos. El OM de antienlace (σ_{1s}^*) se forma por la resta de los OA, y tiene una energía mayor porque hay un *nodo* entre los núcleos y la mayor parte de la densidad electrónica se encuentra fuera de la región internuclear.



El OM de enlace en el H_2 está distribuido mayormente *entre* los núcleos, con los núcleos atraídos a los electrones participantes. Un electrón en este OM puede deslocalizar su carga sobre un volumen mucho mayor al que es posible en su OA individual. Debido a esto, las repulsiones electrón-electrón se reducen, el OM de enlace tiene *menor* energía que los OA aislados. Por tanto, cuando los electrones ocupan este orbital, la molécula es *más estable* que los átomos separados. En contraste, el OM de antienlace tiene un nodo entre los núcleos, y la mayor parte de su densidad electrónica está *fuera* de la región internuclear. Los electrones no protegen un núcleo del otro; esto incrementa las repulsiones nucleares y hace que el OM de antienlace tenga *mayor* energía que los OA aislados. En consecuencia, cuando el orbital de antienlace se ocupa, la molécula es *menos estable* que cuando el orbital está vacío.

Tanto el OM de enlace como el de antienlace son **OM sigma (σ)**, porque son cilíndricamente simétricos alrededor de una línea imaginaria que pasa a través de los núcleos. El OM de enlace se representa por σ_{1s} ; esto es, un OM σ formado por la combinación de dos OA 1s. Los orbitales de antienlace se identifican con un asterisco como superíndice, así que aquel derivado de los OA 1s es σ_{1s}^* (pronunciado "sigma uno es asterisco").

Para que interactúen de manera efectiva y formen OM, *los orbitales atómicos deben tener energías y orientaciones similares*. Los orbitales 1s en los dos átomos de H tienen energía y orientación idénticas, así que interactúan fuertemente. Este punto será importante cuando consideremos moléculas compuestas de átomos con muchos subniveles.

Llenado de orbitales moleculares con electrones Los electrones llenan los OM de la misma manera que los OA:

- Los orbitales se llenan en orden ascendente de energía (principio de aufbau).
- Un orbital tiene una capacidad máxima de dos electrones con espines opuestos (principio de exclusión).
- Los orbitales de la misma energía se llenan parcialmente, con espines paralelos, antes de que se llene cualquiera de ellos (regla de Hund).

Los **diagramas de orbitales moleculares** muestran las energías relativas y el número de electrones en cada OM, así como los OA de los cuales se forman. La figura 11.15 representa el diagrama de OM para H_2 .

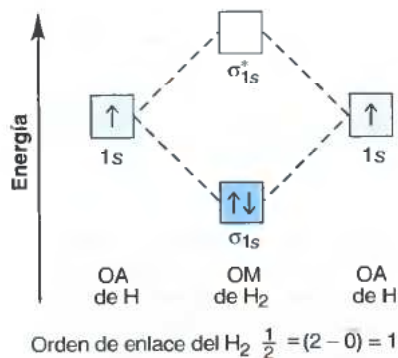


Figura 11.15 El diagrama de OM para H_2 . Las cajas de orbitales indican las energías relativas y la ocupación electrónica de los OM, y los OA de los cuales se forman. Dos electrones, uno de cada átomo de H, llenan el OM σ_{1s} de menor energía, mientras que el OM σ_{1s}^* , de mayor energía, permanece vacío. (La ocupación de electrones también se indica por la intensidad del color en las cajas.)

La teoría de OM redefine el orden de enlace. En una estructura de Lewis, el orden de enlace es el número de pares de electrones por enlace. El **orden de enlace OM** es el número de electrones en los OM de enlace, menos el número en OM de antienlace, dividido entre dos:

$$\text{Orden de enlace} = \frac{1}{2} [(\text{núm. de } e^- \text{ en OM de enlace}) - (\text{núm. de } e^- \text{ en OM de antienlace})] \quad (11.1)$$

Por tanto, para el H_2 , el orden de enlace es $\frac{1}{2}(2 - 0) = 1$. Un orden de enlace mayor que cero indica que la especie molecular es estable en comparación con los átomos separados; mientras que un orden de enlace cero implica que no hay una estabilidad neta, y, por tanto, no hay probabilidad de que se forme. En general, *a mayor orden de enlace, más fuerte es el enlace*.

Otra similitud en las discusiones de OM y OA, es que podemos escribir configuraciones electrónicas para una molécula. El símbolo para cada OM ocupado se muestra entre paréntesis, y el número de electrones está escrito fuera como un superíndice. Así, la configuración del H_2 es $(\sigma_{1s})^2$.

Uno de los primeros triunfos de la teoría de OM fue su habilidad para *predecir* la existencia del He_2^+ , la molécula-ion de helio, que está compuesta de dos núcleos de helio y tres electrones. Usemos la teoría de OM para ver por qué existe el He_2^+ y, al mismo tiempo, por qué no existe el He_2 . En el He_2^+ el orbital atómico $1s$ forma los orbitales moleculares, así que el diagrama de OM, mostrado en la figura 11.16A, se parece al del H_2 . Los tres electrones entran a los OM, para dar un par de electrones en el OM σ_{1s} y un electrón solitario en el OM σ_{1s}^* . El orden de enlace es $\frac{1}{2}(2 - 1) = \frac{1}{2}$. Así, el He_2^+ tiene un enlace relativamente débil, pero puede existir. De hecho, estas especies iónicas moleculares se han observado frecuentemente cuando los átomos de He chocan con iones He^+ . Su configuración electrónica es $(\sigma_{1s})^2(\sigma_{1s}^*)^1$.

Por otra parte, el He_2 tiene cuatro electrones para colocarlos en sus OM σ_{1s} y σ_{1s}^* . Como muestra la figura 11.16B, ambos, los orbitales de enlace y los de antienlace están llenos. La estabilización que se gana por el par de electrones en el OM de enlace, se cancela por la desestabilización a partir del par de electrones en el OM de antienlace. Podemos predecir, de su orden de enlace igual a cero, $[\frac{1}{2}(2 - 2) = 0]$, que la molécula He_2 covalente no existe, y así lo han confirmado hasta ahora los experimentos.

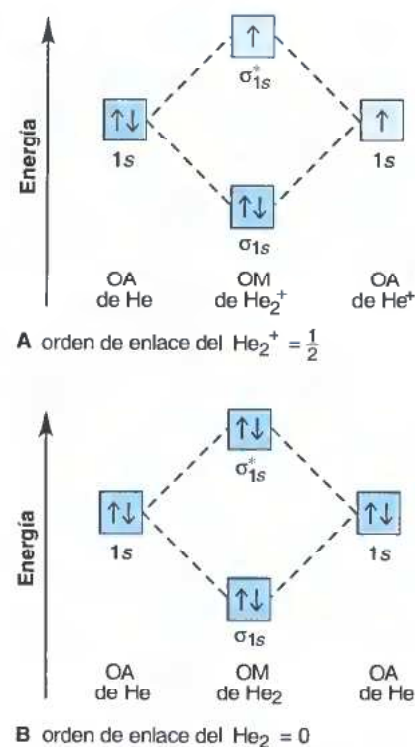


Figura 11.16 Diagramas de OM para el He_2^+ y para el He_2 . **A**, En el He_2^+ se colocan tres electrones en los OM a fin de aumentar la energía para dar un OM σ_{1s} lleno y un OM σ_{1s}^* parcialmente lleno. El orden de enlace de $\frac{1}{2}$, implica que el He_2^+ existe. **B**, En el He_2 , los cuatro electrones de valencia llenan ambos, los OM, σ_{1s} y σ_{1s}^* , así que no hay una estabilización neta (orden de enlace = 0).

Ejemplo 11.3 Predicción de la estabilidad de las especies usando diagramas OM

PROBLEMA Use diagramas de OM para predecir cuál de los dos existe, H_2^+ o H_2^- . Determine sus órdenes de enlace y sus configuraciones electrónicas.

PLAN En estas especies, los orbitales $1s$ forman OM, de modo que los diagramas OM son similares al del H_2 . Determinamos el número de electrones en cada especie y los distribuimos en pares a los OM de enlace y antienlace, en orden creciente de energía. Obtenemos el orden de enlace con la ecuación 11.1 y escribimos la configuración electrónica como se describió en el texto.

SOLUCIÓN Para el H_2^+ . Ya que el H_2 tiene dos e^- , el H_2^+ tiene sólo uno, como se muestra en el margen (*arriba*).

El orden de enlace es $\frac{1}{2}(1 - 0) = \frac{1}{2}$, así que predecimos que el H_2^+ existe. La configuración electrónica es $(\sigma_{1s})^1$.

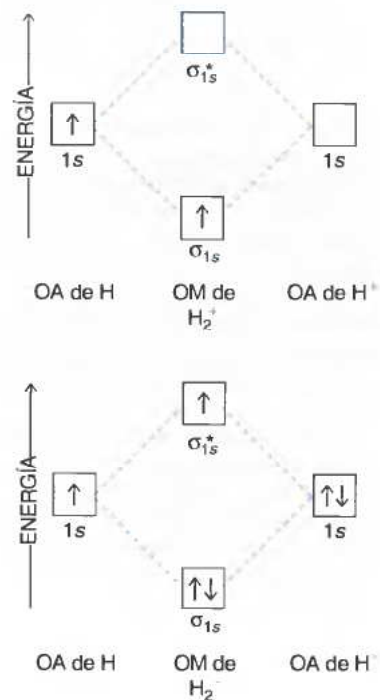
Para el H_2^- . Ya que el H_2 tiene dos e^- , H_2^- tiene tres, como se ilustra en el margen (*abajo*).

El orden de enlace es $\frac{1}{2}(2 - 1) = \frac{1}{2}$, así que predecimos que el H_2^- sí existe. La configuración electrónica es $(\sigma_{1s})^2(\sigma_{1s}^*)^1$.

REVISIÓN El número de electrones en los OM iguala al número de OA, como debe ser.

COMENTARIO Ambas formas se han detectado espectroscópicamente. El H_2^+ se encuentra en el material que contiene H en las estrellas; el H_2^- se ha obtenido en el laboratorio.

Problema de aplicación 11.3 Use un diagrama de OM para predecir de cuál de los dos iones híbridos se formará (H^-) o H_2^{2-} . Calcule el orden de enlace del H_2^{2-} y escriba su configuración electrónica.



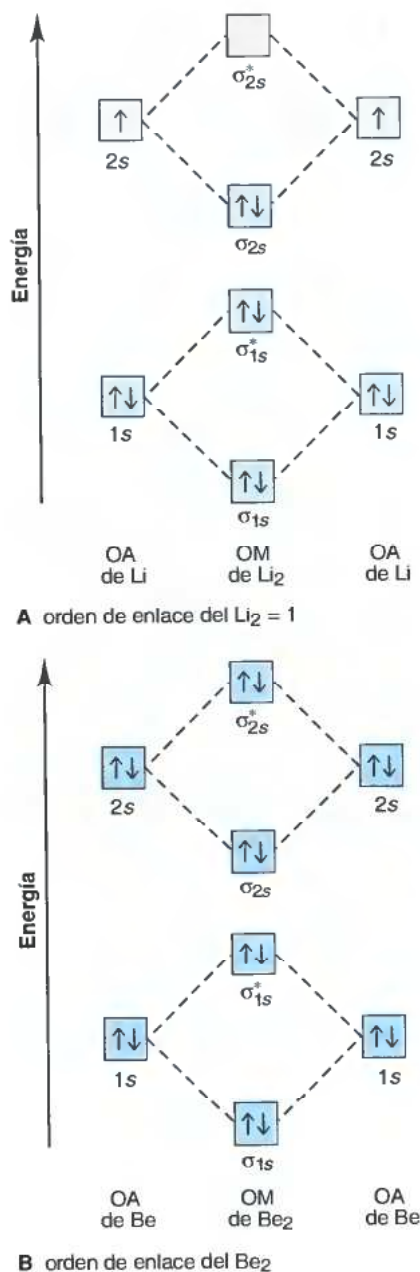


Figura 11.17 Enlaces en las moléculas diatómicas homonucleares del bloque s.

A, Diagrama de OM para el Li_2 . Los OM obtenidos de la combinación de orbitales 1s, son de menor energía que aquellos obtenidos de los orbitales 2s. Los seis electrones de los dos átomos de litio llenan los tres OM de abajo, y el σ_{2s}^* permanece vacío. Con un orden de enlace de 1, el Li_2 sí se forma. **B**, Diagrama de OM para el Be_2 . Los ocho electrones de los dos átomos del Be_2 llenan todos los OM disponibles de manera que no se produce una estabilización neta. El estado basal del Be_2 , tiene un orden de enlace cero y nunca ha sido observado.

Moléculas diatómicas homonucleares de los elementos del periodo 2

Las moléculas diatómicas homonucleares son aquellas compuestas de dos átomos idénticos. Ya está familiarizado con varias del periodo 2 — N_2 , O_2 y F_2 — en sus formas elementales, como se encuentran bajo condiciones estándar. Otras del periodo 2 que se han observado únicamente en experimentos en fase gaseosa son, Li_2 , Be_2 , B_2 , C_2 y Ne_2 . Una descripción de OM de estas especies proporciona algunas pruebas interesantes del modelo. Veamos aquéllas del bloque s, primero los grupos 1A(1) y 2A(2), y después las del bloque p, desde el grupo 3A(13) hasta el 8A(18).

Enlace en las moléculas diatómicas del bloque s Li y Be existen como metales en condiciones normales, pero veamos que predice la teoría del OM para su estabilidad como los gases diatómicos dilitio (Li_2) y diberilio (Be_2).

Estos átomos tienen electrones en 1s y 2s. Así como los OM formados de los orbitales 1s, los orbitales 2s son orbitales σ , así que son cilíndricamente simétricos alrededor del eje internuclear. Las energías relativas de los OM responden al orden de los OA que los forman: un OA 2s es de mayor energía que un 1s, así que los OM σ_{2s} y σ_{2s}^* son mayores en energía que los OM σ_{1s} y σ_{1s}^* . Los seis electrones de dos átomos de Li entran a los OM en orden creciente de energía, dos electrones por orbital con espines opuestos, como se ve en la figura 11.17A. El dilitio tiene cuatro electrones en los OM de enlace y dos en el OM de antienlace de baja energía; por tanto, su orden de enlace es $\frac{1}{2}(4 - 2) = 1$. El Li_2 ha sido observado. Su configuración electrónica completa es $(\sigma_{1s})^2(\sigma_{1s}^*)^2(\sigma_{2s})^2$, pero normalmente sólo mostramos la configuración que se forma con los electrones de valencia, en este caso, el 2s; de modo que queda $(\sigma_{2s})^2$.

El diagrama de OM para el Be_2 , se muestra en la figura 11.17B, tiene llenos los OM σ_{2s} y σ_{2s}^* . Esta situación es similar para el He_2 , que discutimos previamente. El orden de enlace es $\frac{1}{2}(4 - 4) = 0$; consistente con esto, nunca se ha observado el estado basal de la molécula de Be_2 .

Note que en los diagramas de OM para el Li_2 y el Be_2 , los OM σ_{1s} y σ_{1s}^* están llenos. Ya que el efecto estabilizador del OM σ_{1s} cancela la desestabilización del OM σ_{1s}^* ; estos OM no contribuyen de manera global al enlace. De aquí en adelante, los diagramas de OM muestran únicamente los OM creados por la combinación de los electrones de valencia de los OA.

Orbitales moleculares formados de la combinación de orbitales p atómicos

Conforme nos movemos hacia el bloque p, se ven implicados los orbitales 2p, así que primero consideremos las formas y energías de los OM que resultan de sus combinaciones. Recuerde que los orbitales p pueden interactuar entre ellos desde dos direcciones diferentes, como se muestra en la figura 11.18. Las combinaciones extremo-extremo producen un par de OM σ , el σ_{2p} y σ_{2p}^* . Combinaciones laterales producen un par de OM $\pi(\pi)$, π_{2p} y π_{2p}^* . Al igual que los OM de los orbitales s, los OM de las combinaciones de los orbitales p tienen su mayor densidad electrónica entre los núcleos, mientras los OM de antienlace tienen un nodo entre los núcleos y la mayoría de su densidad electrónica fuera de la región internuclear.

El orden de los niveles de energía de los OM, sin importar si son de enlace o antienlace, se basa en los niveles de energía de los OA y en el modo en que se combinan los orbitales p.

- Los OM formados de orbitales 2s son menores en energía que los formados con orbitales 2p, porque los OA 2s son menores en energía que los OA 2p.
- Los OM de enlace tienen menos energía que los OM de antienlace, así que σ_{2p} es de menor energía que σ_{2p}^* , y π_{2p} es menor que π_{2p}^* .
- Los orbitales atómicos p pueden interactuar en mayor medida cuando se da extremo a extremo que cuando es de manera lateral (lado a lado). Por tanto, el OM σ_{2p} es de menor energía que el OM π_{2p} ; de manera similar, el efecto desestabilizador del OM σ_{2p}^* es mayor que el del OM π_{2p}^* .

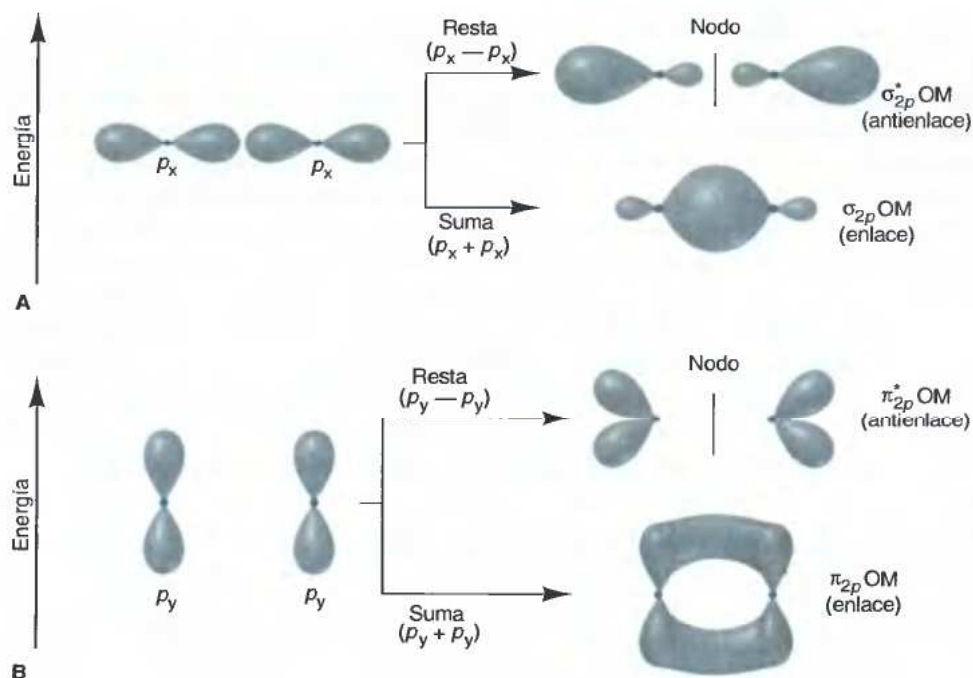


Figura 11.18 Contornos y energías de los OM σ y π a través de combinaciones de orbitales atómicos 2p. **A**, Los orbitales p que se encuentran en la línea entre los átomos (normalmente designados p_x) sufren un traslape entre sus extremos y forman OM σ_{2p} y σ_{2p}^* . Note la mayor densidad electrónica entre los núcleos para el orbital de enlace y el nodo entre los núcleos para el orbital de antienlace. **B**, Los orbitales p que se encuentran perpendiculares al eje internuclear (p_y o p_z) producen un traslape lateral para formar dos OM π . Un enlace de OM π_{2p} tiene su mayor densidad electrónica por arriba y por abajo del eje internuclear; un OM π_{2p}^* es un orbital de antienlace con un nodo entre los núcleos y su densidad electrónica se encuentra fuera de la región internuclear. (Las interacciones p_z son las mismas que las que se muestran para p_y .)

Así, el orden de energía para los OM derivados de los orbitales 2p es:

$$\sigma_{2p} < \pi_{2p} < \pi_{2p}^* < \sigma_{2p}^*$$

Existen tres orbitales 2p perpendiculares en cada átomo, así que cuando se combinan seis orbitales p , los dos que se encuentran por sus extremos forman un OM σ y uno σ^* , y los dos pares que interactúan lateralmente forman dos OM tipo π de la misma energía y dos π^* también de la misma energía. Al combinar estas orientaciones con el orden de energía se obtiene el diagrama de OM *esperado*, para las moléculas diatómicas homonucleares del bloque p , periodo 2, que se muestra en la figura 11.19A.

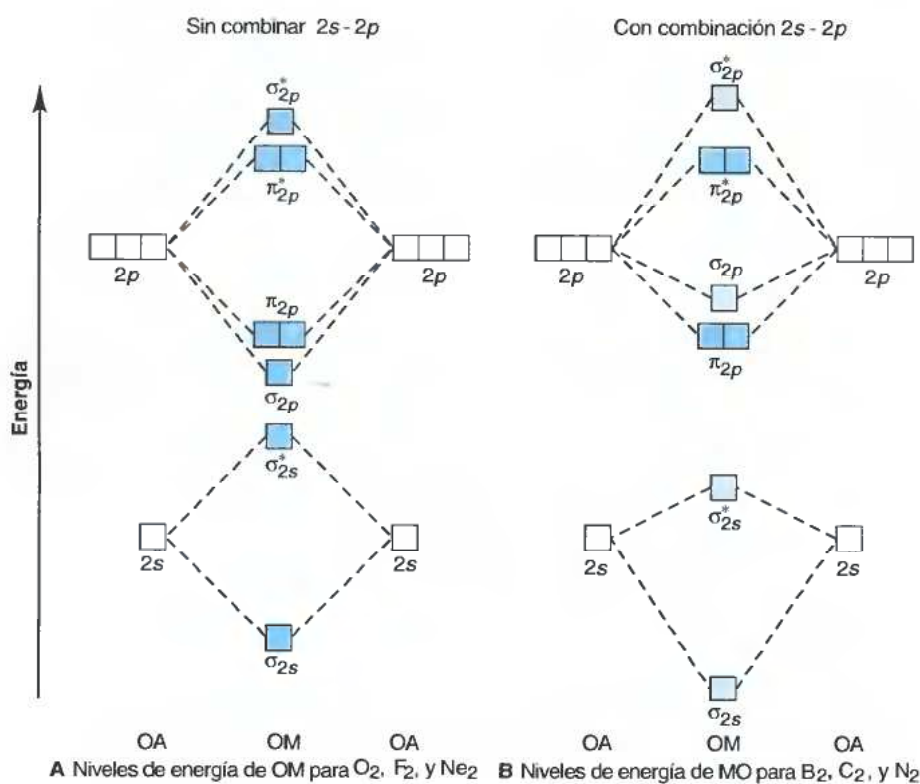


Figura 11.19 Niveles de energía relativos para los OM de las moléculas diatómicas homonucleares del periodo 2.

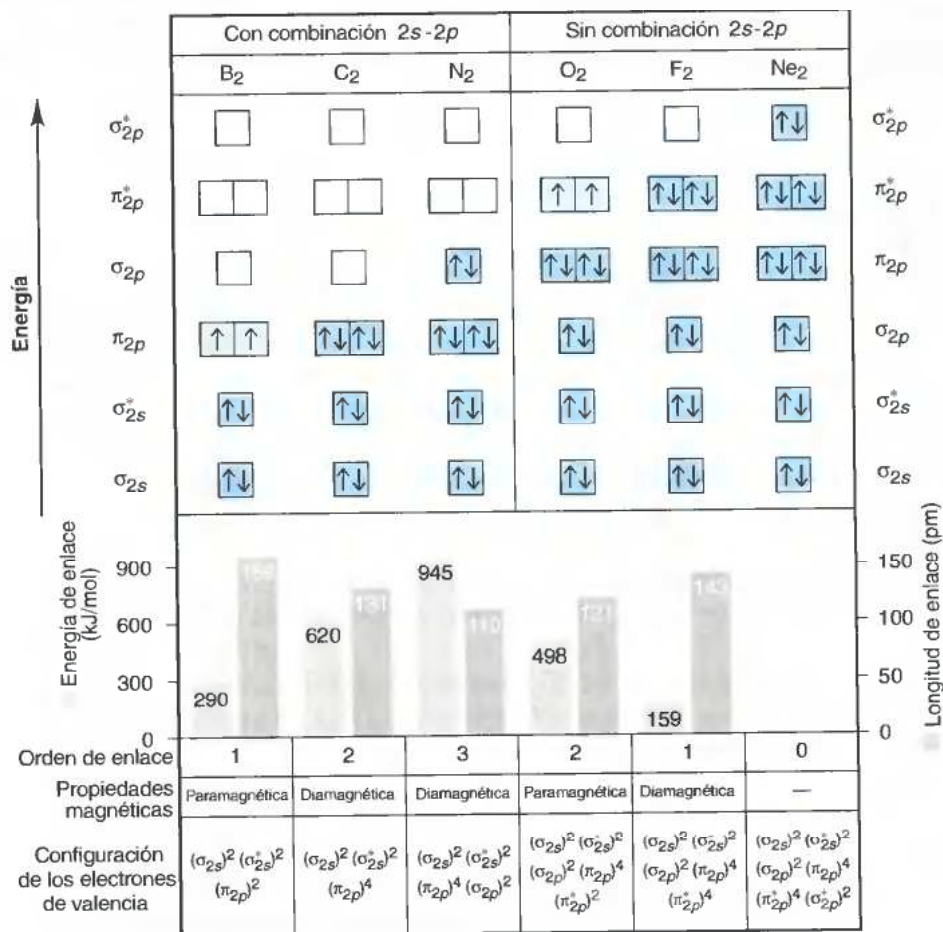
A, Niveles de energía de los OM para el O_2 , F_2 y Ne_2 . Los seis orbitales 2p de los dos átomos forman seis OM que son de mayor energía que los dos OM producidos por los dos OA 2s. Los OA que forman orbitales π dan como resultado, dos OM de enlace (π_{2p}) de igual energía y dos OM de antienlace (π_{2p}^*), también de igual energía. Esta secuencia de niveles de energía surge de una combinación mínima de orbitales 2s y 2p. **B**, Niveles de energía de OM para el B_2 , C_2 y N_2 . Debido a que hay una combinación significativa entre los orbitales 2s y 2p, las energías de los OM σ formados de los orbitales 2p aumentan, y los OM que se producen con orbitales 2s disminuye. El mayor efecto de esta combinación de orbitales para la secuencia de OM es que el orbital σ_{2p} tiene una mayor energía que el π_{2p} . (Para mayor claridad, aquellos OM afectados por la combinación se muestran en púrpura.) (Véase sección a color, pág. 16.)

Otro factor adicional influye el orden de energía de OM. Recuerde que sólo los OA de energía similar interactúan para formar OM. En la figura 11.19A, se asume que el orden de los OA *s* y *p* es tan diferente en energía que no interactúan entre ellos: en terminología de OM, los orbitales no se *combinan*. Esto es cierto para O, F y Ne. En estos átomos, las repulsiones se dan conforme se aparean los electrones 2*p*, lo cual eleva la energía de los orbitales 2*p* suficientemente por encima de la energía de los orbitales 2*s* para minimizar la combinación de orbitales. Sin embargo, cuando los OA en 2*p* están parcialmente llenos, como en los átomos de B, C y N, las repulsiones son pequeñas, así que las energías 2*p* están mucho más cercanas a las energías 2*s*. Como resultado, suceden algunas combinaciones entre los orbitales 2*s* de un átomo y el extremo de un orbital 2*p* del otro. Esta combinación de orbitales *disminuye* la energía de los OM σ_{2s} y σ_{2s}^* , y *aumenta* la de los OM σ_{2p} y σ_{2p}^* ; no se afectan los OM π . El diagrama de OM desde el B₂ hasta el N₂ (figura 11.19B, en la página anterior) refleja esta combinación de OA. El único cambio que afecta esta discusión es el *orden inverso* de los OM σ_{2p} y π_{2p} .

El enlace en las moléculas diatómicas del bloque p La figura 11.20 muestra la secuencia de OM, la ubicación de los electrones en éstos y algunas propiedades desde el B₂ hasta el Ne₂. Note que *a un mayor orden de enlace corresponde una mayor energía de enlace y una menor longitud de enlace*. Observe también cómo la ocupación de los orbitales se relaciona con el comportamiento magnético. Recuerde, del capítulo 8, que los espines de los electrones desapareados en un átomo (o ion) provocan que la sustancia sea *paramagnética*, es decir, que sea atraída hacia un campo magnético externo. Si todos los espines de los electrones están apareados, la sustancia es *diamagnética*, es decir, que no se afecta (o es débilmente repelida) por el campo magnético. Las mismas observaciones se aplican a moléculas. Estas propiedades no se abordan directamente en la teoría de RPECV o en la de EV.

Figura 11.20 Ocupación del OM y propiedades moleculares desde el B₂ hasta el Ne₂.

Se muestra la secuencia de los OM y su población de electrones para las moléculas diatómicas homonucleares del bloque p del periodo 2 [grupos 3A(13) al 8A(18)]. El orden de enlace, la longitud de enlace, la energía de enlace, el comportamiento magnético y la configuración de los electrones de valencia aparecen abajo. Observe la correlación entre el orden de enlace y la energía de enlace, y que ambos están relacionados de manera inversa con la longitud de enlace. (Véase sección a color, pág. 17.)



La molécula de B_2 tiene seis electrones externos para colocar en sus OM. Cuatro de ellos completan los OM σ_{2s} y σ_{2s}^* . Los dos electrones restantes entran en los OM π_{2p} uno en cada orbital, para mantener la regla de Hund. Con cuatro electrones en los OM de enlace y dos en los OM de antienlace, el orden de enlace del B_2 es $\frac{1}{2}(4 - 2) = 1$. Como es de esperarse por su diagrama de OM, el B_2 es paramagnético.

Los dos electrones adicionales presentes en el C_2 completan los dos OM π_{2p} . Puesto que el C_2 tiene dos electrones de enlace más que el B_2 , su orden de enlace es de 2 y el enlace esperado más fuerte y corto. Todos los electrones están apareados y, como predice el modelo, el C_2 es diamagnético.

En el N_2 , los dos electrones adicionales completan el OM σ_{2p} . El orden de enlace resultante es de 3, el cual es consistente con el enlace triple en la estructura de Lewis. Como predice el modelo, la energía de enlace es mayor y la longitud del enlace es más corta, y el N_2 es diamagnético.

Con el O_2 , realmente se aprecia la ventaja de la teoría de OM sobre las teorías basadas en orbitales localizados. Durante años, parecía imposible reconciliar las teorías de enlace con la fuerza del enlace y el comportamiento magnético del O_2 . Por un lado, los datos indicaban una molécula con enlace doble que es paramagnética; por otro, existen dos estructuras de Lewis posibles para el O_2 , pero ninguna compatible con la molécula anterior. Una tiene un enlace doble y todos los electrones apareados, y la otra un enlace sencillo y dos electrones desapareados:



La teoría de OM resuelve esta paradoja de manera bella. Como se muestra en la figura 11.20, el orden de enlace del O_2 es 2: ocho electrones ocupan los OM de enlace, y cuatro los OM de antienlace [$\frac{1}{2}(8 - 4) = 2$]. Note la menor energía de enlace y la mayor longitud de enlace con respecto al N_2 . Los *dos* electrones con mayor energía ocupan los *dos* OM π_{2p}^* con espines desapareados (paralelos), haciendo a la molécula paramagnética. La figura 11.21 muestra O_2 líquido suspendido entre los polos de un poderoso imán.

Los dos electrones adicionales en el F_2 completan los orbitales π_{2p}^* , lo que disminuye el orden de enlace a 1, y la ausencia de electrones desapareados hace que el F_2 sea diamagnético. Como se esperaba, la energía de enlace es menor y la distancia de enlace es mayor que en el O_2 . Observe que la energía de enlace del F_2 es sólo aproximadamente la mitad de la del B_2 , aun cuando ambos tienen el mismo orden de enlace. El F es más pequeño que el B, así que podría esperarse un enlace más fuerte. Pero los 18 electrones en el volumen más pequeño del F_2 , comparados con los 10 electrones del B_2 , causan repulsiones mayores y hacen que el enlace sencillo del F_2 sea más fácil de romper.

El último miembro de la serie, el Ne_2 , no existe, por la misma razón por la que el He_2 tampoco: todos los OM están completos, así que la estabilización por electrones de enlace cancela la desestabilización de los electrones de antienlace, y el orden de enlace es de cero.

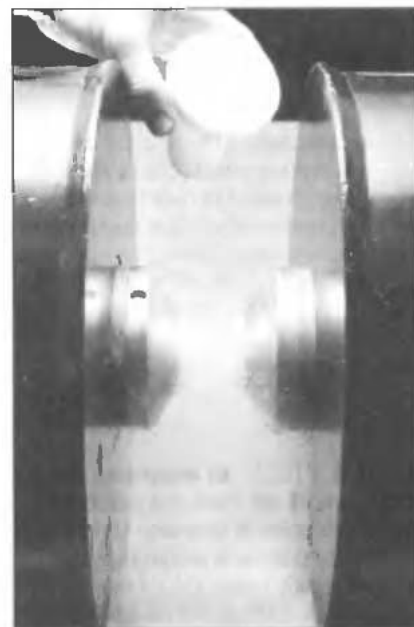


Figura 11.21 Las propiedades paramagnéticas del O_2 . El O_2 líquido es atraído hacia los polos de un imán porque es paramagnético, como predice la teoría de OM. Una sustancia diamagnética caería entre los polos.

Ejemplo 11.4 Uso de la teoría de OM para explicar las propiedades del enlace

PROBLEMA Como muestran los siguientes datos, al eliminar un electrón del N_2 se forma un ion con un enlace más débil y más largo que en la molécula original, mientras que el ion formado de un O_2 tiene un enlace más fuerte y más corto:

	N_2	N_2^+	O_2	O_2^+
Energía de enlace (kJ/mol)	945	841	498	623
Longitud de enlace (pm)	110	112	121	112

Explique estos hechos con diagramas que muestren la secuencia y la ocupación de los OM.

PLAN Primero determinamos el número de electrones de valencia en cada especie. Luego dibujamos la secuencia de los niveles de energía de los OM para las cuatro especies —recordemos que son diferentes para el N_2 y el O_2 (véase figuras 11.19 y

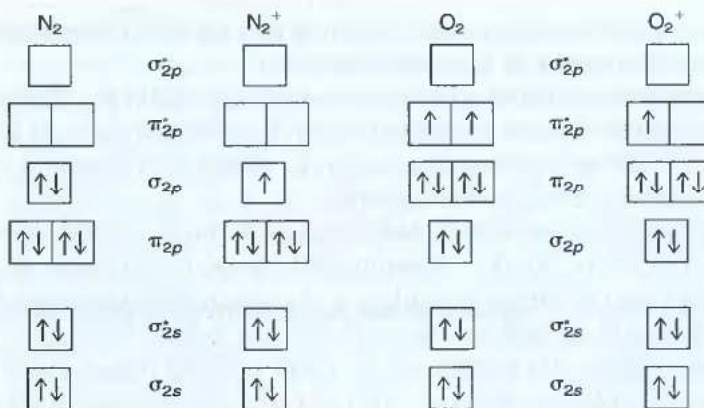
11.20)—, y las llenamos con electrones. Finalmente, calculamos los órdenes de enlace y los comparamos con los datos. Recuerda que el orden de enlace está directamente relacionado con la energía de enlace, e inversamente con la longitud de enlace.

SOLUCIÓN Determinemos de los electrones de valencia:

N tiene 5 e^- de valencia, así que N_2 tiene 10 y N_2^+ tiene 9

O tiene 6 e^- de valencia, por tanto, O_2 tiene 12 y O_2^+ tiene 11

Ahora, tracemos y llenemos el diagrama de OM:



Cálculo de los órdenes de enlace:

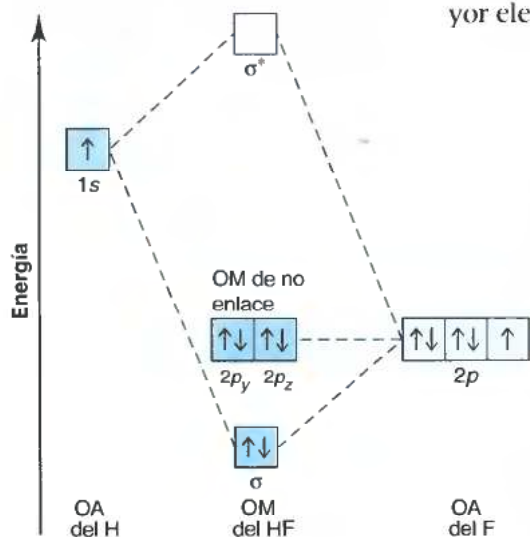
$$\frac{1}{2}(8 - 2) = 3 \quad \frac{1}{2}(7 - 2) = 2.5 \quad \frac{1}{2}(8 - 4) = 2 \quad \frac{1}{2}(8 - 3) = 2.5$$

Cuando el N_2 forma el N_2^+ , un electrón de *enlace* se elimina. Por tanto, el orden de enlace disminuye, de modo que el N_2^+ tiene un enlace más débil y largo que el N_2 . Cuando el O_2 forma al O_2^+ , se elimina un electrón de *antienlace*. Por tanto, el orden de enlace aumenta, y entonces el O_2^+ tiene un enlace más fuerte y corto que el O_2 .

REVISIÓN La respuesta es razonable en términos de las relaciones entre el orden de enlace, la energía de enlace y la longitud de enlace. Revise que el número total de los electrones de enlace y de antienlace igualen el número calculado de los electrones de valencia.

Problema de aplicación 11.4 Determine los órdenes de enlace para las siguientes especies F_2^{2-} , F_2^- , F_2 , F_2^+ , F_2^{2+} . Lista las especies en orden creciente de la energía de enlace y en orden ascendente de su longitud de enlace.

Figura 11.22 El diagrama de OM para el HF. Para una molécula covalente polar, el diagrama OM es asimétrico porque el átomo más electronegativo tiene OA de menor energía. En el HF, el OM de enlace está más cercano en energía al orbital 2p del F. Los electrones que no participan en el enlace ocupan OM de no enlace. (El OA 2s del F no se muestra.)



Descripción de OM de algunas moléculas diatómicas heteronucleares

Las moléculas diatómicas *heteronucleares*, aquellas compuestas por dos átomos *diferentes*, tienen diagramas de OM asimétricos debido a que los orbitales atómicos de los dos átomos tienen energías distintas. Los átomos con mayor carga nuclear efectiva (Z_{ef}) mantienen unidos sus electrones más cerca del núcleo y así tienen orbitales atómicos de menor energía (sección 8.2). Una mayor Z_{ef} también le otorga a estos átomos mayor electronegatividad. Apliquemos la teoría de OM a los enlaces del HF y el NO.

El enlace en el HF Para formar los OM del fluoruro de hidrógeno, combinamos los OA apropiados de los átomos aislados de H y F. La mayor carga nuclear efectiva del F mantiene unidos todos sus electrones más fuertemente de lo que el núcleo del H mantiene unido el suyo. Como resultado, *todos* los orbitales ocupados del F tienen una menor energía que el orbital 1s del H. Por tanto, el orbital 1s del H interactúa únicamente con los orbitales 2p del F, y sólo uno de los tres orbitales 2p, digamos el $2p_x$, se emplea para el traslape final. Esto resulta en un OM σ y un OM σ^* . Los otros dos orbitales p del F ($2p_y$ y $2p_z$) no están presentes en el enlace. Se denominan **OM de no enlace** y, como se muestra en la figura 11.22, tienen la misma energía que los OA aislados.

Puesto que el OM de enlace que se ocupa está más cercano en energía a los OA del F, puede decirse que el orbital del F contribuye más al enlace en el HF que lo que hace el orbital del H. En general, en las moléculas covalentes polares, *los OM de enlace están más cercanos en energía a los*

OA del átomo más electronegativo. En efecto, la mayor electronegatividad del flúor disminuye la energía del OM de enlace y atrae los electrones del enlace más cerca de su núcleo.

El enlace en el NO El monóxido de nitrógeno (óxido nítrico) es una molécula altamente reactiva debido a que tiene un electrón solitario. Dos posibles estructuras de Lewis para el NO, con cargas formales (sección 10.1), son



Ambas estructuras muestran un enlace doble, pero la energía de enlace *medida* sugiere que el orden de enlace es *mayor* que 2. Además, no está claro dónde reside el electrón solitario, aunque las menores cargas formales para la estructura I sugieren que está en el átomo de N.

La teoría de OM predice el orden de enlace e indica la ubicación del electrón solitario sin dificultad. El diagrama de OM de la figura 11.23 es asimétrico, con los OA del O, más electronegativo, con menor energía. Los 11 electrones de valencia del NO entran en los OM en orden de energía creciente, dejando al electrón solitario en uno de los orbitales π_{2p}^* . Ocho electrones de enlace y tres de antienlace resultan en un orden de enlace de $\frac{1}{2}(8 - 3) = 2.5$, más en concordancia con el valor experimental que con cualquiera de las estructuras de Lewis. Los electrones de enlace residen en OM más cercanos en energía a los OA del átomo de O. El electrón solitario ocupa un orbital de antienlace. Debido a que este orbital recibe una contribución más grande de los orbitales 2p del N, el electrón solitario reside más cerca del átomo de N.

Las descripciones de OM para el ozono y el benceno

La teoría de OM se extiende a moléculas con más de dos átomos, pero las formas de los orbitales y los diagramas de OM son demasiado complejos para tratarlos aquí con detalle. Sin embargo, discutiremos brevemente cómo el modelo elimina la necesidad de las formas de resonancia y ayuda a explicar los efectos de la absorción de energía.

Recordemos que no puede dibujarse una sola estructura de Lewis que ilustre adecuadamente los enlaces en moléculas como el ozono y el benceno, debido a que los enlaces sencillos y dobles adyacentes en realidad tienen propiedades idénticas. En vez de eso, nos vemos forzados a dibujar más de una estructura y combinarlas mentalmente en un híbrido de resonancia. El modelo de EV también se basa en la resonancia, debido a que representa enlaces *localizados* de pares de electrones.

En contraste, la teoría de OM dibuja una estructura de OM deslocalizados σ y π de enlace y de antienlace. La figura 11.24 muestra las formas de los OM de enlace π de menor energía en el benceno y el ozono. Cada uno contiene un par de electrones. Las densidades de electrones extendidas permiten la deslocalización de este par de electrones π sobre la molécula completa, eliminando así la necesidad de formas de resonancia separadas. En el benceno, los lóbulos hexagonales superior e

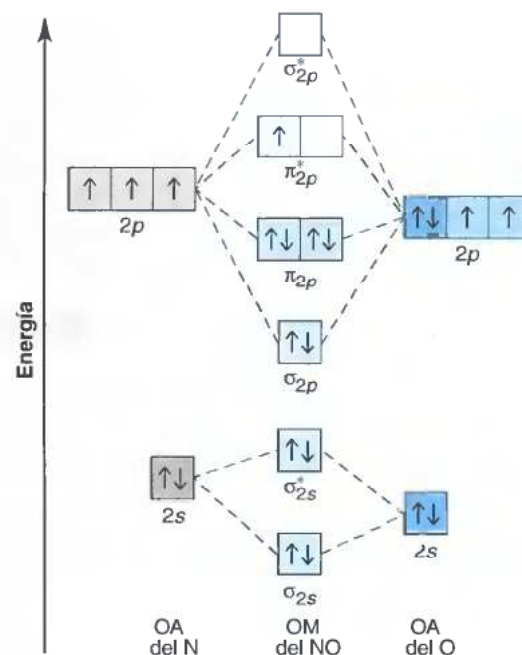


Figura 11.23 El diagrama de OM para el NO. Once electrones ocupan los OM en el óxido nítrico. Observe que el electrón solitario ocupa un OM de antienlace, cuya energía está más cercana al OA del átomo de N (menos electronegativo).

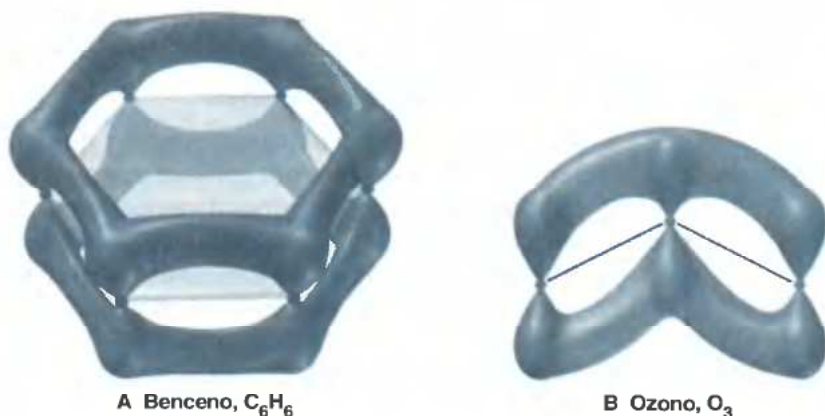


Figura 11.24 Los OM de enlace π de menor energía en el benceno y en el ozono. La teoría de los OM elimina la necesidad de resonancia al proponer orbitales que están altamente deslocalizados. **A**, El OM de enlace π más estable en el benceno (C_6H_6) tiene lóbulos hexagonales de densidad electrónica por encima y por debajo del plano σ de los seis átomos de C. **B**, El OM de enlace π más estable en el ozono (O_3) se extiende por encima y por debajo del plano σ de los tres átomos de O (mostrado como líneas de enlace).

inferior de este OM de enlace π se encuentran por arriba y por abajo de los seis núcleos de carbono. En el ozono, los dos lóbulos de este OM de enlace π se extienden sobre y debajo de los tres núcleos de oxígeno.

Otra gran ventaja de la teoría de OM es su utilidad para explicar los estados excitados y los espectros de las moléculas. Puede aclarar, por ejemplo, por qué el O_3 se descompone cuando absorbe radiación ultravioleta (UV) en la estratosfera (los electrones de enlace se excitan para entrar en orbitales de antienlace vacíos), y por qué el espectro UV del benceno tiene sus características bandas de absorción.

Resumen de la sección

La teoría de OM trata una molécula como una colección de núcleos con orbitales moleculares deslocalizados sobre toda la estructura. Los orbitales atómicos de energía comparable pueden sumarse o restarse para obtener OM de enlace y de antienlace, respectivamente. Los OM de enlace tienen la mayoría de su densidad electrónica entre los núcleos y son de menor energía que los orbitales atómicos; la mayoría de la densidad electrónica de los OM de antienlace no reside entre los núcleos, así que estos OM tienen una mayor energía. Los OM se llenan en orden de su energía con electrones que tienen espines opuestos. Los diagramas de OM muestran los niveles de energía y la ocupación de los orbitales. Aquéllos de moléculas diatómicas homonucleares del periodo 2 explican las observaciones de energía de enlace, longitud de enlace y comportamiento magnético. En moléculas diatómicas heteronucleares, los OM de enlace tienen una mayor contribución del átomo más electronegativo. La teoría de OM elimina la necesidad de formas de resonancia en moléculas más grandes.

Perspectiva del capítulo

En este capítulo, hemos visto que los dos más importantes modelos de enlace covalente basados en orbitales, teniendo cada uno sus propios beneficios y limitaciones, se complementan uno al otro. A continuación, veremos cómo la distribución de electrones en los enlaces de las moléculas origina el comportamiento físico

de líquidos y sólidos. La teoría de OM entrará en juego para una comprensión más profunda de los metales. Y, después del capítulo 12 siguen dos capítulos en los que se aplican los conceptos que se han aprendido desde el capítulo 7 acerca del comportamiento de las sustancias inorgánicas, orgánicas y bioquímicas.

Los siguientes objetivos de aprendizaje, con los números de las secciones y/o los ejemplos (E) entre paréntesis, pueden ser útiles para enfocar el estudio:

Comprensión de estos conceptos

1. Las ideas principales de la teoría de enlace valencia: traslape de orbitales, opuestos del electrón espín e hibridación como medios para fundamentar las formas de las moléculas (11.1)
2. Cómo se combinan los orbitales para formar orbitales híbridos con diferentes orientaciones espaciales (11.1)
3. La diferencia entre el traslape extremo a extremo y de lado a lado, y el origen de los enlaces sigma (σ) y pi (π) en moléculas simples (11.2)
4. Cómo los dos modos de traslape de orbitales originan enlaces sencillos, dobles y triples (11.2)
5. Por qué el enlace π restringe la rotación en moléculas con doble enlace (11.2)
6. La diferencia entre el enlace localizado de la teoría de EV y el enlace deslocalizado de la teoría de OM (11.3)
7. Cómo la suma o resta de OA forma OM de enlace o de antienlace (11.3)

8. Las formas de los OM originados por combinaciones de dos orbitales s y combinaciones de dos orbitales p (11.3)
9. Cómo el orden de enlace de OM predice la estabilidad de las especies moleculares (11.3)
10. Cómo la teoría de OM explica el enlace y las propiedades de las moléculas diatómicas homonucleares y heteronucleares simples de átomos del periodo 2 (11.3)

Dominio de estas habilidades

1. Usar la forma molecular para postular qué orbitales híbridos son utilizados por un átomo central (E 11.1)
2. Describir los orbitales y tipos de enlace en una molécula (E 11.2)
3. Dibujar diagramas de OM, escribir las configuraciones electrónicas y calcular los órdenes de enlace de especies moleculares (E 11.3)
4. Explicar las propiedades de enlace con diagramas de OM (E 11.4)

Para revisión y referencia

Palabras clave

Sección 11.1

teoría de enlace valencia (EV)
hibridación
orbital híbrido
orbital híbrido sp
orbital híbrido sp^2

orbital híbrido sp^3
orbital híbrido sp^3d
orbital híbrido sp^3d^2

Sección 11.2

enlace sigma (σ)
enlace pi (π)

Sección 11.3

teoría de orbitales
moleculares (OM)
orbital molecular (OM)
OM de enlace
OM de antienlace
OM sigma (s)

diagrama de OM
orden de enlace de OM
molécula diatómica
homonuclear
OM pi (p)
OM de no enlace

Ecuaciones y relaciones clave

11.1 Para calcular el orden de enlace del OM (p. 417): Orden de enlace = $\frac{1}{2}[(\text{núm. de } e^- \text{ en OM de enlace}) - (\text{núm. de } e^- \text{ en OM de antienlace})]$

Figuras y tablas resaltadas

Estas figuras (F) y tablas (T) proporcionan una revisión rápida de ideas clave.

F11.2 Los orbitales híbridos sp en el BeCl_2 gaseoso (p. 406)

T11.1 Composición de orbitales híbridos (p. 410)

F11.8 Los pasos conceptuales desde la fórmula molecular hasta los orbitales híbridos (p. 410)

F11.10 Los enlaces σ y π del etileno (C_2H_4) (p. 412)

F11.14 Contornos y energías de los OM de enlace y de antienlace en el H_2 (p. 416)

F11.18 Contornos y energías de los OM σ y π a través de combinaciones de OA $2p$ (p. 419)

F11.20 Ocupación del OM y propiedades moleculares desde el B_2 hasta el Ne_2 (p. 420)

Respuestas a los problemas de aplicación

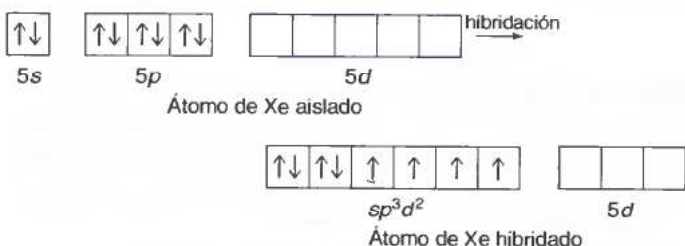
11.1 a) La forma es lineal, así que el Be tiene una hibridación sp .



b) La forma es tetraédrica, así que el Si tiene una hibridación sp^3 .



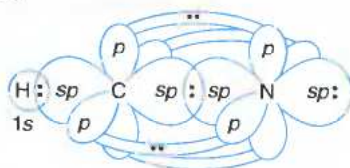
c) La forma es de cuadro plano, así que el Xe tiene una hibridación sp^3d^2 .



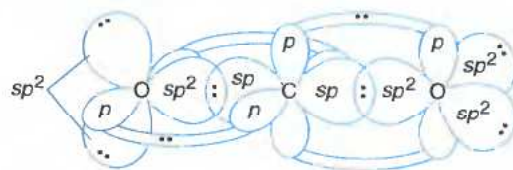
11.2 a) $\text{H}-\text{C}\equiv\text{N}$: HCN es lineal,

así que el C tiene una hibridación sp . El N también tiene una hibridación sp . Uno de los sp del C se traslapa con el $1s$ del H para formar un enlace σ . El otro sp del C se traslapa con un sp del N para formar un enlace σ .

El otro sp del N tiene un par solitario. Dos orbitales π no hibridados del N y dos del C se traslapan para formar dos enlaces π .

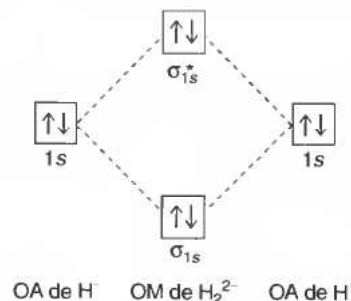


b) $\text{O}=\text{C}=\text{O}$



El CO_2 es lineal, así que el C tiene una hibridación sp . Ambos átomos de O tienen hibridación sp^2 . Cada uno de los sp del C se traslapa con cada uno de los sp^2 del O para formar dos enlaces σ . De igual manera, cada uno de los dos orbitales p no hibridados del C forma un enlace π con un p no hibridado de uno de los dos átomos de O. Dos sp^2 de cada O tienen pares solitarios.

11.3



No parece que exista. $\text{OE} = \frac{1}{2}(2 - 2) = 0$; $(\sigma_{1s})^2(\sigma_{1s}^*)^2$

11.4 Orden de enlace: $\text{F}_2^{2-} = 0$; $\text{F}_2^- = \frac{1}{2}$; $\text{F}_2 = 1$; $\text{F}_2^+ = 1\frac{1}{2}$
 $\text{F}_2^{2+} = 2$

Energía de enlace: $\text{F}_2^{2-} < \text{F}_2^- < \text{F}_2 < \text{F}_2^+ < \text{F}_2^{2+}$

Longitud de enlace: $\text{F}_2^{2+} < \text{F}_2^+ < \text{F}_2 < \text{F}_2^-$; F_2^{2-} no tiene enlace

Problemas

Las respuestas a los problemas con un número en color se encuentran al final del libro. Las secciones de problemas corresponden con el texto y se dan el (los) número(s) de ejemplos importantes. Muchos ofrecen preguntas para la revisión de conceptos, ejercicios para aumentar habilidades (escritos en pares similares), y problemas en contextos relevantes. Posteriormente, se presentan problemas de comprensión basados en el material de cualquier sección y capítulo previo.

Teoría de enlace valencia (EV) y la hibridación de los orbitales

(Ejemplo 11.1)

■ Preguntas para revisión de conceptos

11.1 ¿Qué tipo de hibridación de orbitales del átomo central corresponde a cada arreglo de grupo de electrones: a) trigonal planar; b) octaédrica; c) lineal; d) tetraédrica; e) trigonal bipyramidal?

11.2 ¿Cuál es la hibridación de orbitales de un átomo central que tiene un par solitario y se enlaza a: a) otros dos átomos; b) otros tres átomos; c) otros cuatro átomos; d) otros cinco átomos?

11.3 ¿En qué se diferencian el carbono y el silicio con respecto al tipo de orbitales disponibles para hibridación? Explicar.

11.4 ¿Cuántos orbitales híbridos se forman cuando cuatro orbitales en un átomo central se combinan durante una reacción? Explicar.

■ Ejercicios para desarrollar habilidades (en parejas)

11.5 Dar el número y tipo de orbital híbrido que se forma cuando se combina cada conjunto de orbitales atómicos:

a) dos *d*, uno *s* y tres *p* b) tres *p* y uno *s*

11.6 Dar el número y tipo de orbital con híbrido que se forma cuando se hibridan cada conjunto de orbitales atómicos:

a) uno *p* y uno *s* b) tres *p*, uno *d* y uno *s*

11.7 ¿Cuál es la hibridación del nitrógeno en a) NO; b) NO₂; c) NO₂⁻?

11.8 ¿Cuál es la hibridación del carbono en a) CO₃²⁻; b) C₂O₄²⁻; c) NCO⁻?

11.9 ¿Cuál es la hibridación del cloro en a) ClO₂; b) ClO₃⁻; c) ClO₄⁻?

11.10 ¿Cuál es la hibridación del bromo en a) BrF₃; b) BrO₂⁻; c) BrF₅?

11.11 ¿Qué tipos de orbitales atómicos del átomo central se hibridan para formar orbitales híbridos en a) SiClH₃; b) CS₂?

11.12 ¿Qué tipos de orbitales atómicos del átomo central se hibridan para formar orbitales híbridos en a) Cl₂O; b) BrCl₃?

11.13 ¿Qué tipos de orbitales atómicos del átomo central se hibridan para formar orbitales híbridos en a) SCl₃F; b) NF₃?

11.14 ¿Qué tipos de orbitales atómicos del átomo central se hibridan para formar orbitales híbridos en a) PF₅; b) SO₃²⁻?

11.15 Usar diagramas parciales de orbitales para mostrar cómo los orbitales atómicos del átomo central llevan a orbitales híbridos en a) GeCl₄; b) BCl₃; c) CH₃⁺.

11.16 Usar diagramas parciales de orbitales para mostrar cómo los orbitales atómicos del átomo central llevan a orbitales híbridos en a) BF₄⁻; b) PO₄³⁻; c) SO₃.

11.17 Usar diagramas parciales de orbitales para mostrar cómo los orbitales atómicos del átomo central llevan a orbitales híbridos en a) SeCl₂; b) H₃O⁺; c) IF₄⁻.

11.18 Usar diagramas parciales de orbitales para mostrar cómo los orbitales atómicos del átomo central llevan a orbitales híbridos en a) AsCl₃; b) SnCl₂; c) PF₆⁻.

■ Problemas en contexto

11.19 El isocianato de metilo, CH₃—N=C=O, es un intermediario en la manufactura de muchos pesticidas. Fue notoria en 1984, la fuga en una planta de manufactura que mató a más de 2 000 personas en Bhopal, India. ¿Cuál es la hibridación del N y de los dos átomos de C en el isocianato de metilo? Dibujar la forma de la molécula.

La manera en que se traslapan los orbitales y los tipos de enlace covalente

(Ejemplo 11.2)

■ Preguntas para revisión de conceptos

11.20 ¿Las siguientes afirmaciones son falsas o verdaderas? Corregir cualquiera que sea falsa.

a) Dos enlaces σ comprenden un doble enlace.

b) Un triple enlace consiste en un enlace π y dos enlaces σ.

c) Los enlaces formados con orbitales atómicos *s* siempre son enlaces σ.

d) Un enlace π limita la rotación sobre el eje del enlace σ.

e) Un enlace π consiste en dos pares de electrones.

f) El traslape de extremo a extremo resulta en un enlace con zonas de densidad de electrones encima y debajo del eje del enlace.

■ Ejercicios para desarrollar habilidades (en parejas)

11.21 Describir los orbitales híbridos usados por el átomo central y tipo(s) de enlaces formados en a) NO₃⁻; b) CS₂; c) CH₂O.

11.22 Describir los orbitales híbridos usados por el átomo central y tipo(s) de enlaces formados en a) O₃; b) I₃⁻; c) COCl₂.

11.23 Describir los orbitales híbridos usados por el (los) átomo(s) central(es) y tipo(s) de enlaces formados en a) FNO; b) C₂F₄; c) (CN)₂.

11.24 Describir los orbitales híbridos usados por el (los) átomo(s) central(es) y tipo(s) de enlaces formados en a) BrF₃; b) CH₃C≡CH; c) SO₂.

■ Problemas en contexto

11.26 El 2-buteno (CH₃CH=CHCH₃) es un material inicial para la manufactura de aceites lubricantes y muchos otros compuestos. Dibujar dos diferentes estructuras para el 2-buteno, indicando los enlaces σ y π en cada una.

Teoría de orbitales moleculares (OM) y deslocalización de electrones

(Ejemplos 11.3 y 11.4)

■ Preguntas para revisión de conceptos

11.26 Dos orbitales *p* pertenecientes a un átomo y dos orbitales *p* de otro átomo se combinan para formar orbitales moleculares para los átomos unidos. ¿Cuántos OM resultarán de esta combinación? Explicar.

11.27 Ciertos orbitales atómicos en dos átomos fueron combinados para formar los siguientes OM. Mencionar los orbitales

atómicos usados, los OM formados, y explicar cuál OM tiene mayor energía:



11.28 ¿Cómo se comparan entre sí los OM de enlace y de antienlace que se forman a partir de un determinado par de OA con respecto a: a) energía; b) presencia de nodos; c) densidad internuclear de electrones?

11.29 Los OM de antienlace siempre tienen por lo menos un nodo. ¿Un OM de enlace puede tener un nodo? En caso afirmativo, dibujar un ejemplo.

■ **Ejercicios para desarrollar habilidades (en parejas)**

11.30 ¿Cuántos electrones se requieren para completar a) un OM de enlace σ ; b) un OM de antienlace π ; c) los OM formados por una combinación de los orbitales $1s$ de dos átomos?

11.31 ¿Cuántos electrones se requieren para completar a) los OM formados al combinarse de los orbitales $2p$ de dos átomos; b) un OM σ_{2p}^* ; c) los OM formados de la combinación de los orbitales $2s$ de dos átomos?

11.32 Mostrar las formas de los OM de enlace y de antienlace constituidos por la combinación de a) un orbital s y un orbital p ; b) dos orbitales p (extremo a extremo).

11.33 Mostrar las formas de los OM de enlace y de antienlace constituidos por la combinación de a) dos orbitales s ; b) dos orbitales p (lado a lado).

11.34 Usar diagramas de OM y los órdenes de enlace que obtenga de ellos para contestar lo siguiente: a) ¿El Be_2^+ es estable? b) ¿El Be_2^+ es diamagnético? c) ¿Cuál es la configuración de los electrones de valencia del Be_2^+ ?

11.35 Usar diagramas de OM y los órdenes de enlace que obtenga de ellos para contestar lo siguiente: a) ¿El O_2^- es estable? b) ¿El O_2^- es paramagnético? c) ¿Cuál es la configuración de los electrones de valencia del O_2^- ?

11.36 Usar diagramas de OM para colocar al C_2^- , C_2 y C_2^+ en orden de a) energía de enlace creciente; b) longitud de enlace creciente.

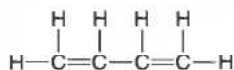
11.37 Usar diagramas de OM para colocar al B_2^+ , B_2 y B_2^- en orden de a) energía de enlace decreciente; b) longitud de enlace decreciente.

■ **Problemas de comprensión**

Problemas con un asterisco (*) son más difíciles.

11.38 Pronosticar la forma, escribir la hibridación del átomo central, y proporcionar los ángulos de enlace ideales y cualquier desviación esperada en a) BrO_3^- ; b) AsCl_4^- ; c) SeO_4^{2-} ; d) BiF_5^{2-} ; e) SbF_4^+ ; f) AlF_6^{3-} ; g) IF_4^+ .

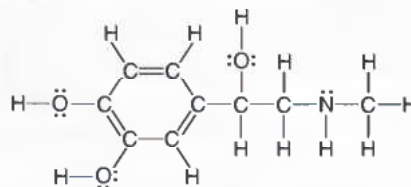
11.39 El butadieno (mostrado abajo) es un gas incoloro usado para fabricar hule BUNA sintético y muchos otros compuestos



a) ¿Cuántos enlaces σ y enlaces π tiene la molécula?
b) ¿Son posibles los arreglos estructurales *cis/trans* sobre los dobles enlaces? Explicar.

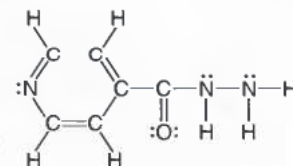
11.40 La epinefrina (o adrenalina) es una hormona que existe en forma natural, pero que también se fabrica comercialmente para usarse como estimulante para el corazón, como descon-

gestionante nasal y para el tratamiento del glaucoma. Una estructura válida de Lewis es



a) ¿Cuál es la hibridación de cada átomo de C, O y N?
b) ¿Cuántos enlaces σ tiene la molécula?
c) ¿Cuántos electrones π están deslocalizados en el anillo?

11.41 La isoniazida es un agente antibacterial particularmente útil contra muchas cepas comunes de tuberculosis. Una estructura de Lewis válida se muestra a la derecha.



a) ¿Cuántos enlaces σ hay en la molécula?
b) ¿Cuál es la hibridación de cada átomo de C y de N?

11.42 El modo de traslape de orbitales influye grandemente en la fuerza del enlace. Usar la teoría de EV para explicar por qué el enlace $\text{C}=\text{C}$ (614 kJ/mol) *no* es el doble de fuerte que el enlace $\text{C}-\text{C}$ (347 kJ/mol) y por qué el enlace $\text{C}\equiv\text{C}$ (839 kJ/mol) *no* es tres veces más fuerte.

11.43 En cada una de las siguientes ecuaciones, ¿cuál cambio de hibridación, en caso de haberlo, ocurre para el átomo subrayado?

- a) $\underline{\text{B}}\text{F}_3 + \text{NaF} \rightarrow \text{Na}^+ \underline{\text{B}}\text{F}_4^-$
- b) $\underline{\text{P}}\text{Cl}_3 + \text{Cl}_2 \rightarrow \underline{\text{P}}\text{Cl}_5$
- c) $\underline{\text{H}}\text{C}\equiv\text{HC} + \text{H}_2 \rightarrow \underline{\text{H}}_2\text{C}=\text{CH}_2$
- d) $\underline{\text{Si}}\text{F}_4 + 2\text{F}^- \rightarrow \underline{\text{Si}}\text{F}_6^{2-}$
- e) $\underline{\text{S}}\text{O}_2 + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightarrow \underline{\text{S}}\text{O}_3$

11.44 El tetrazeno (secuencia atómica H_2NNNNH_2) es un tipo de híbrido inestable de nitrógeno que se descompone por arriba de los 0°C en N_2 e hidrazina (N_2H_4).

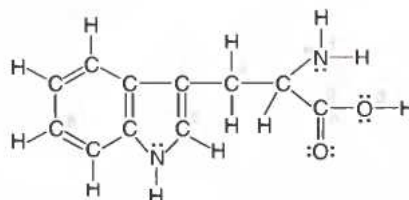
a) ¿Cuál es la hibridación del N en estos tres compuestos?
b) Clasificar los tres tipos de enlaces N-N en términos de longitud y fuerza crecientes.
c) Dibujar estructuras para las formas *cis* y *trans* del tetrazeno y pronosticar cuál, de haberla, es polar.

11.45 Cierta evidencia experimental inesperadamente muestra que las moléculas gaseosas de CaF_2 , SrCl_2 y BaCl_2 tienen formas inclinadas.

a) ¿Qué estructura hubiera esperado para estas moléculas?
b) ¿Qué propiedad pudo haberse medido para proporcionar esa evidencia?

11.46 Usar diagramas orbitales parciales para mostrar cómo los orbitales atómicos en el átomo central conducen a los orbitales híbridos en a) IF_2^- ; b) ICl_3 ; c) XeOF_4 ; d) BHF_2 .

11.47 El triptofano es uno de los aminoácidos típicamente encontrados en las proteínas:



a) ¿Cuál es la hibridación de los átomos de C, N y O numerados?

b) ¿Cuántos enlaces σ están presentes en el triptofano?

c) Pronosticar los ángulos de enlace en los puntos a, b, y c.

11.48 El ángulo de enlace en el NH_3 es 107.3° , mientras que en el PH_3 es de 93.6° . Explicar estos datos usando la teoría de EV.

***11.49** El ion sulfato puede representarse con cuatro enlaces S—O o con dos enlaces S—O y dos enlaces S=O .

a) ¿Cuál representación es mejor desde el punto de vista de las cargas formales?

b) ¿Cuál es la forma del ion sulfato, y qué orbitales híbridos del S se postulan para el enlace σ ?

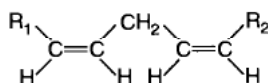
c) En vista de la respuesta del inciso b), ¿qué orbitales del S deben usarse para los enlaces π ? ¿Qué orbitales del O?

d) Dibujar un diagrama de traslape para mostrar cómo un orbital atómico del S y uno del O se combinan para formar un enlace π .

***11.50** El hidrocarburo aleno, $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{CH}_2$, se obtiene indirectamente a partir del petróleo y se usa como precursor para varios tipos de plásticos. ¿Cuál es la hibridación de cada átomo de C del aleno? Hacer un dibujo de los enlaces para el aleno con líneas para los enlaces σ , y mostrar el arreglo de los enlaces π . Asegurar de representar la geometría de la molécula en tres dimensiones.

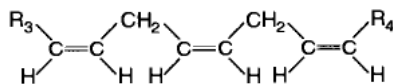
11.51 Muchas moléculas diatómicas heteronucleares inusuales se forman en los gases calientes. Dibujar un diagrama de OM, escribir la configuración de los electrones de valencia, y pronosticar el orden de enlace para: a) BC; b) OF.

***11.52** El ácido linoléico (*abajo*) es un ácido graso esencial que se encuentra en muchos aceites vegetales, como la soya, cacahuate y semilla de algodón. Una propiedad estructural clave de la molécula es la orientación *cis* alrededor de los dos dobles enlaces, donde R_1 y R_2 representan dos diferentes grupos que forman el resto de la molécula.



a) ¿Cuántos compuestos diferentes son posibles, cambiando solamente la disposición *cis/trans* alrededor de estos dos dobles enlaces?

b) ¿Cuántos son posibles para un compuesto similar con tres dobles enlaces?

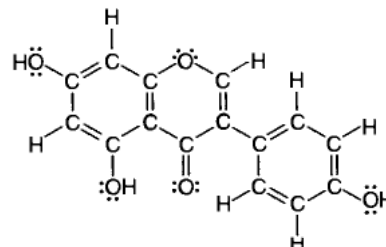


11.53 La molécula de B_2 es paramagnética (véase figura 11.20). ¿Cómo apoya este comportamiento el orden de los niveles de energía de los OM que surgen de la combinación de orbitales $2s$ y $2p$? ¿El comportamiento magnético del B_2 sería diferente si no hubiera combinación de orbitales $2s$ y $2p$? Explicar.

11.54 Aunque el LiF consiste de iones en estado sólido, también existe como moléculas de LiF altamente polares en el estado gaseoso. Con base en las magnitudes relativas de propiedades tales como energía de ionización, afinidad electrónica y electronegatividad, explicar por qué las moléculas son polares. Dibujar un diagrama de OM para el LiF , similar a aquel para el HF , suponiendo que el orbital $2s$ del Li interactúa con el orbital $2p$ del F.

11.55 Hay una preocupación unánime entre las agencias del gobierno de EUA relacionadas con la salud, acerca de que la dieta en ese país contiene demasiada carne, y se han hecho numerosas recomendaciones para fomentar el consumo de más frutas y vegetales. Una de las fuentes más ricas de proteínas vegetales es la soya, disponible en muchas formas, especialmen-

te como queso de soya, o tofu. Este material es parte de la dieta en muchas partes de Asia y recientemente los químicos han aislado un agente anticancerígeno, llamado *genisteína*, del tofu, lo cual puede explicar la incidencia mucho menor de cáncer entre la población del Lejano Oriente. Una estructura de Lewis válida para la genisteína es



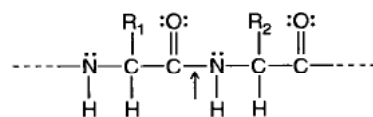
a) ¿La hibridación de cada C en anillo de la derecha es la misma? Explicar.

b) ¿La hibridación del átomo de O en el anillo central es la misma que para el átomo de O en los grupos OH? Explicar.

c) ¿Cuántos enlaces σ entre átomos de carbono-oxígeno hay en la molécula? ¿Cuántos enlaces π carbono-oxígeno?

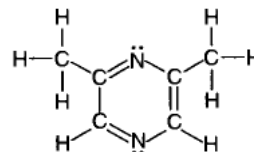
d) ¿Todos los pares solitarios de átomos de oxígeno ocupan el mismo tipo de orbital híbrido? Explicar.

***11.56** Las proteínas simples consisten de aminoácidos enlazados en una larga cadena, una pequeña parte de cuya estructura es



Los experimentos muestran que la rotación sobre el enlace C—N (*flecha*) se restringe en cierta medida. Explicar esto con estructuras de resonancia y mostrar los tipos de enlace presentes.

11.57 El compuesto 2,6-dimetilpirazina le otorga al chocolate su aroma y se usa extensivamente en saborizantes. Una estructura válida de Lewis es

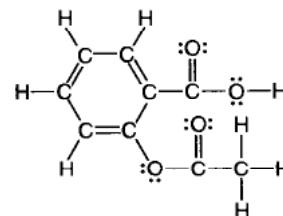


a) ¿Qué orbitales atómicos se combinan para formar los orbitales híbridos del N?

b) ¿En qué tipo de orbitales híbridos residen los pares solitarios del N?

c) ¿La hibridación del C en el CH_3 es la misma que en el anillo? Explicar.

11.58 El ácido acetilsalicílico (aspirina), la medicina más ampliamente usada en el mundo, tiene la siguiente estructura de Lewis:



a) ¿Cuál es la hibridación de cada átomo de C central y de cada átomo de O?

b) ¿Cuántos enlaces π localizados hay presentes?

c) ¿Cuántos átomos de C tienen una forma trigonal planar a su alrededor? ¿Y una forma tetraédrica?