



## Teoria mecanic-cuantică a legăturii chimice - continuare

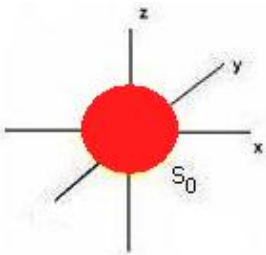
### *Hibridizarea orbitalilor*

- **Orbital atomic** = regiunea din jurul nucleului în care poate fi localizat 1 e<sup>-</sup> în atomul izolat, aflat într-o anumită stare energetică.
- **Hibridizarea orbitalilor**, specifică îndeosebi elementelor din perioada a doua, este un fenomen care **are loc la formarea legăturilor covalente**; ea nu se manifestă în atomii liberi.
- **Hibridizarea orbitalilor** = procesul de întrepătrundere / contopire a orbitalilor puri ai stratului de valență, cu energii identice sau apropiate



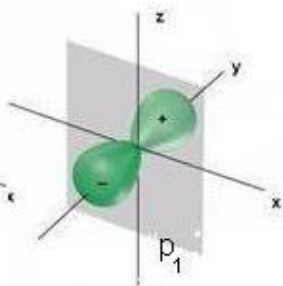
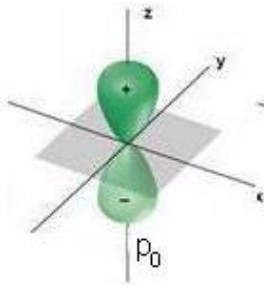
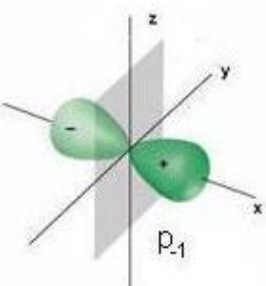
un număr egal de orbitali hibridi, având forma, energia și orientarea spațială diferite de cele ale orbitalilor puri din care provin.

## Reamintesc: **Forma orbitalilor atomici puri:**



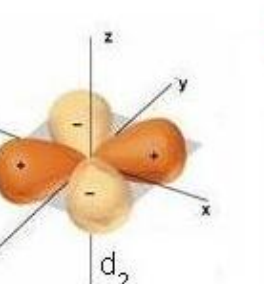
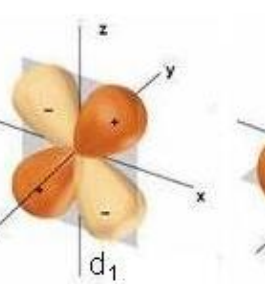
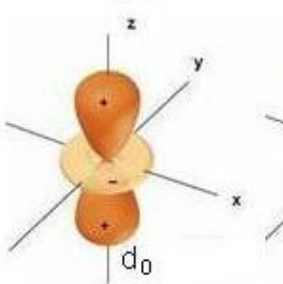
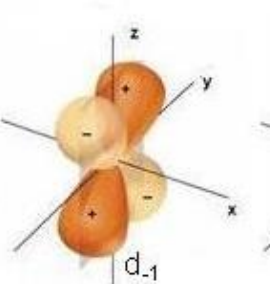
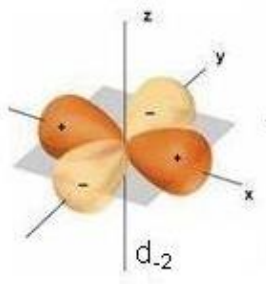
### a). Orbitali de tip s: $l = 0, m = 0$

- formă sferică – nucleul este situat în centrul sferei
- 1 orbital de tip s / pătură



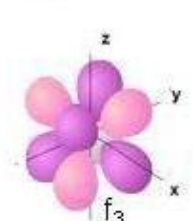
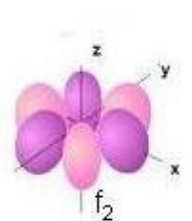
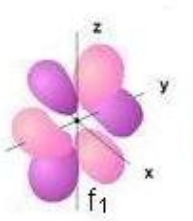
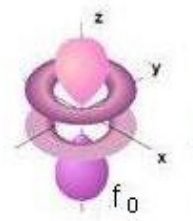
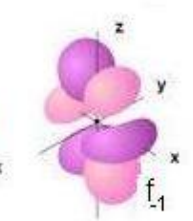
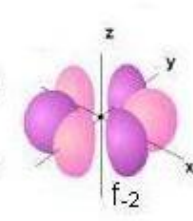
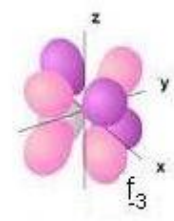
### b). Orbitali de tip p: $l = 1, m = -1, 0, 1$

- formă bilobară
- lobi sunt orientați de-a lungul axelor de simetrie
- 3 orbitali de tip p / pătură



### c). Orbitali de tip d: $l = 2, m = -2, -1, 0, 1, 2$

- formă tetralobară
- 5 orbitali de tip d / pătură



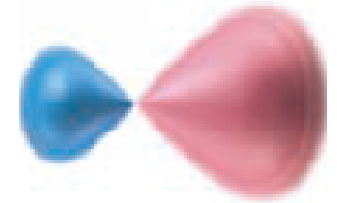
### d). Orbitali de tip f: $l = 3, m = -3, -2, 0, 1, 2, 3$

- 7 orbitali de tip f / pătură

- Orbitalii hibridi au un nr. de lobi = nr. max. de lobi ai unui orbital pur ce intră în combinație.



- Ex: Un orbital hibrid  $sp^n$  are forma bilobară, densitatea electronică fiind concentrată în lobul mare, ceea ce face ca numai acesta să participe la întrepătrundere când se formează legături chimice.

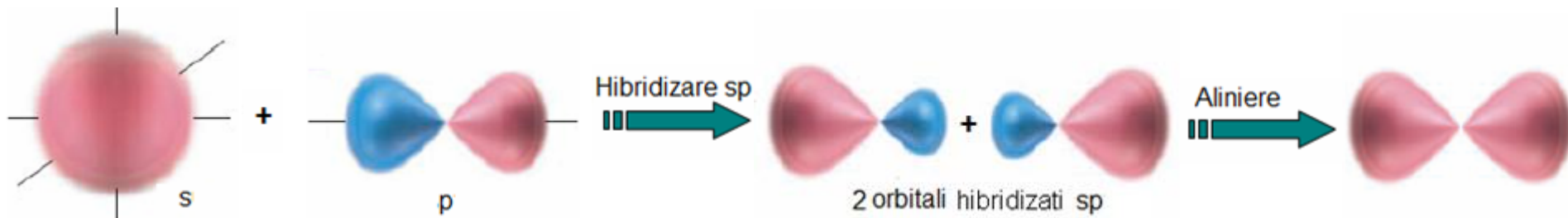


- Dir. pe care sunt orientați lobi hibridilor sunt cele care asigură *minima respingere interelectronică*.

- Există mai multe tipuri de hibridizare, cele mai răspândite în combinațiile chimice fiind cele ale orbitalilor de tip  $s$ ,  $p$  și  $d$ .

### 1). Hibridizarea $sp$

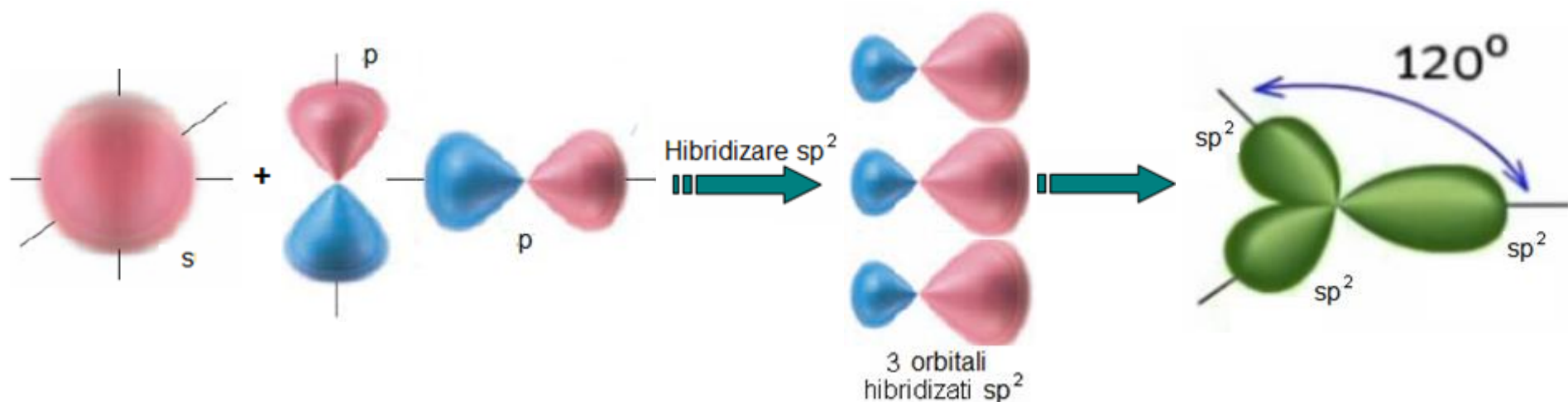
- În acest caz, la formarea de combinații covalente are loc **contopirea orbitalului  $s$  cu unul dintre orbitalii  $p$**  → **2 orbitali hibridi  $sp$** , orientați coliniar.





## 2). Hibridizarea $sp^2$

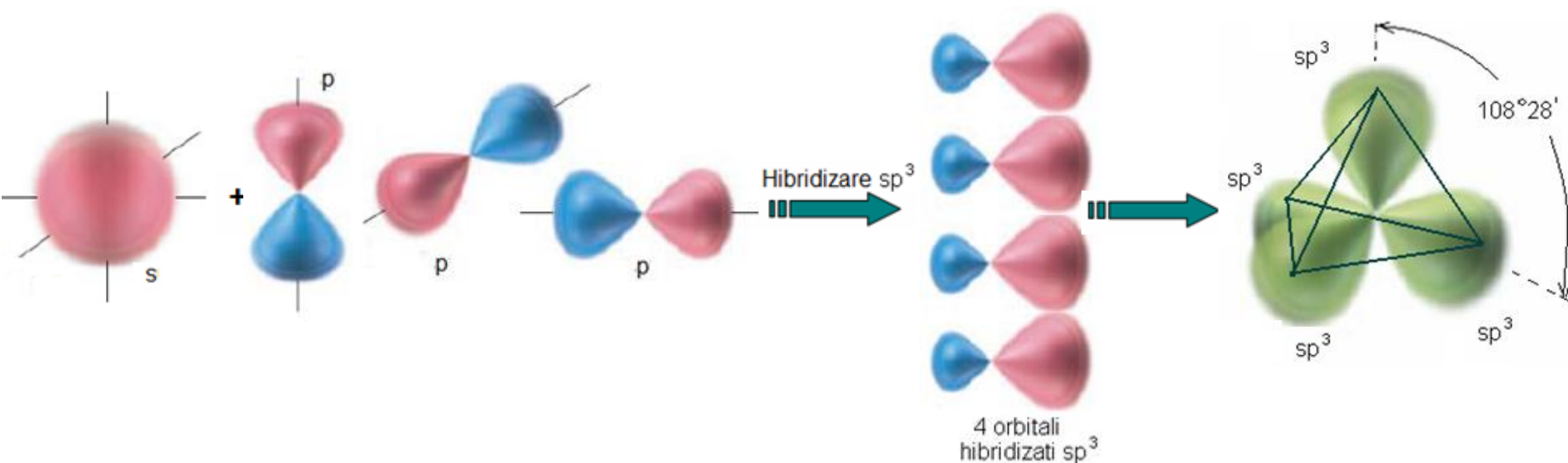
- În acest caz, la formarea de combinații covalente are loc **contopirea orbitalului  $s$  cu 2 dintre orbitali  $p \rightarrow 3$  orbitali hibridi  $sp^2$** , orientați după colțurile unui triunghi echilateral cu unghiul de valență de  $120^\circ$ .





### 3). Hibridizarea $sp^3$

- În acest caz, la formarea de legături covalente **orbitalul  $s$  se contopește cu cei 3 orbitali  $p$**   $\rightarrow$  **4 orbitali hibridi  $sp^3$** , orientați după vârfurile unui tetraedru regulat (piramidă trigonală) cu unghiul de valență de  $108^\circ 28'$ :

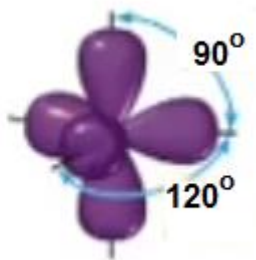




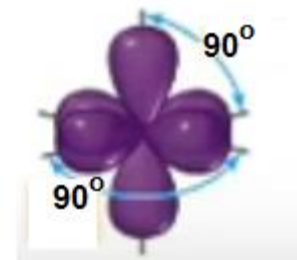
- Elem. perioadelor  $\geq 3$  pot realiza hibridizări și cu implicarea orbitalilor de tip  $d \rightarrow$  *hibridizări  $sd^n$ , sau  $sp^n d^m$ .*

- Ex:

hibridizare  $sp^3d$   
(geometrie  
bipiramidala  
trigonală)



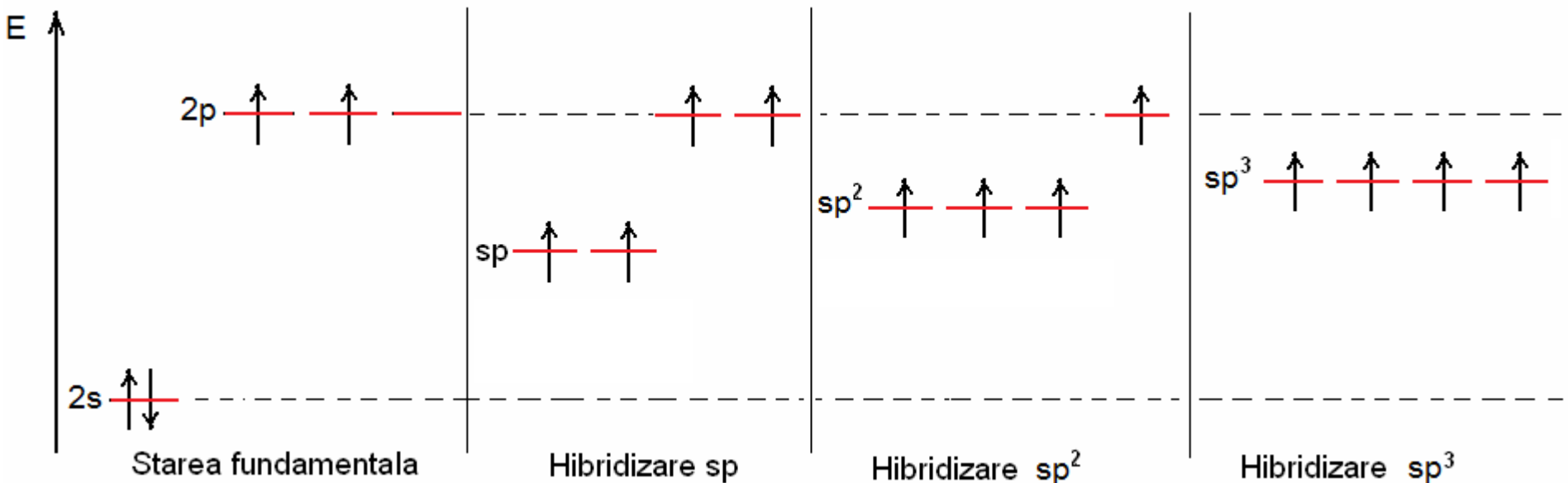
hibridizare  $sp^3d^2$   
(geometrie  
octaedrală)



- Ex: În atomul liber de carbon, cei 4e<sup>-</sup> de valență se află repartizați astfel:

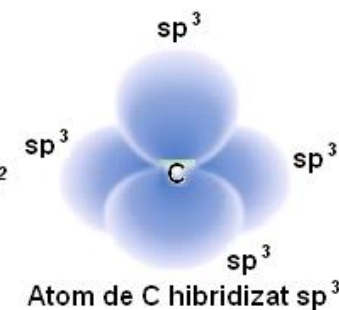
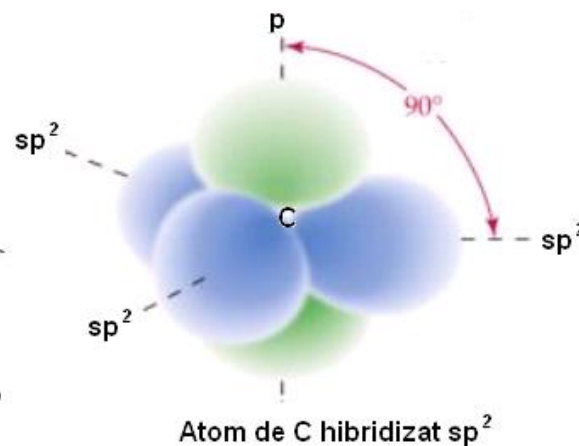
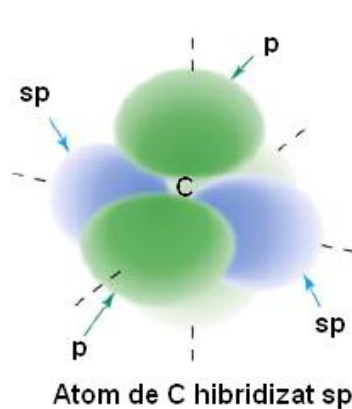


{ 2e<sup>-</sup> în orbitalul 2s  
 și  
 2e<sup>-</sup> în orbitalii 2p:



Atunci când urmează ca atomul de C să formeze legături cu:

- alți 2 atomi, are loc hibridizarea *sp*,
- alți 3 atomi, are loc hibridizarea *sp*<sup>2</sup>,
- alți 4 atomi, are loc hibridizarea *sp*<sup>3</sup>.





## Metoda legăturii de valență (M.L.V.)

- **M.L.V.** consideră că legăturile dintre atomi se realizează prin întrepătrunderea orbitalilor lor atomici (puri sau hibridi), fără o modificare a formei lor.
- **Formarea legăturii e condiționată geometric:** atomii trebuie să se apropie pe o direcție pe care sunt orientați lobi orbitalilor lor atomici.
- Legătura se poate stabili numai printr-o **pereche comună de electroni cu spin opus**, și se poate realiza prin două mecanisme:

- **mecanismul de schimb** →
  - orbitalii atomici care se suprapun să fie monoelectronici
  - electronii să aibă spinul opus.
- **mecanismul donor-acceptor** → suprapunerea unui orbital total ocupat (al donorului) cu un orbital vacant (al acceptorului).

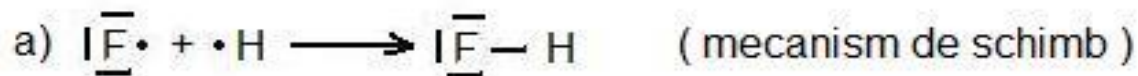




• Pentru o legătură deja formată nu se poate identifica mecanismul de formare - proprietățile moleculelor obținute în cele două procese sunt identice.

Ex: Fluorura de hidrogen (HF) se poate forma:

- fie prin interacția atomilor celor două elemente
- fie prin coordinarea protonului la anionul de fluor

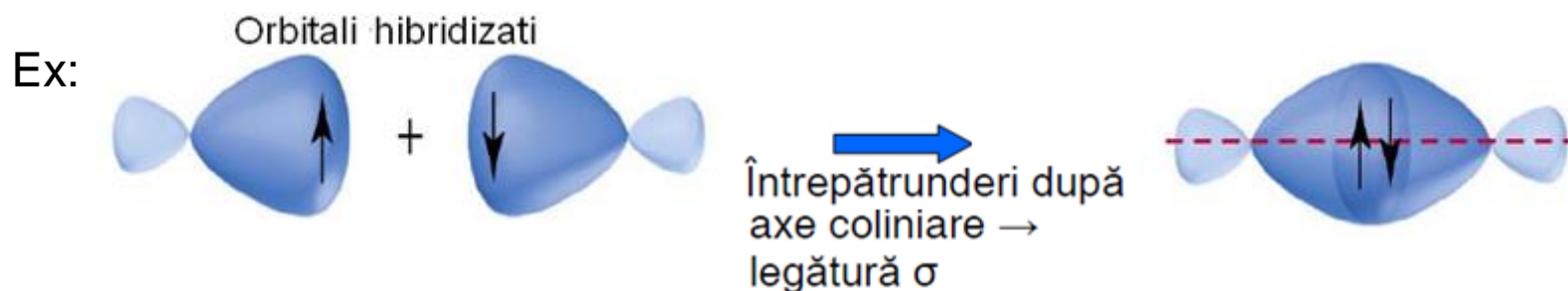




**Clasificarea legăturilor chimice**, după modul de suprapunere a orbitalilor:

## 1. Legătura $\sigma$

• **Legăturile  $\sigma$**  între atomi se pot realiza prin suprapunerea / întrepătrunderea după axe coliniare a oricărui tip de orbitali atomici ai atomilor parteneri; orbitalii își suprapun *câte un singur lob*, **fără modificarea formei acestora**.

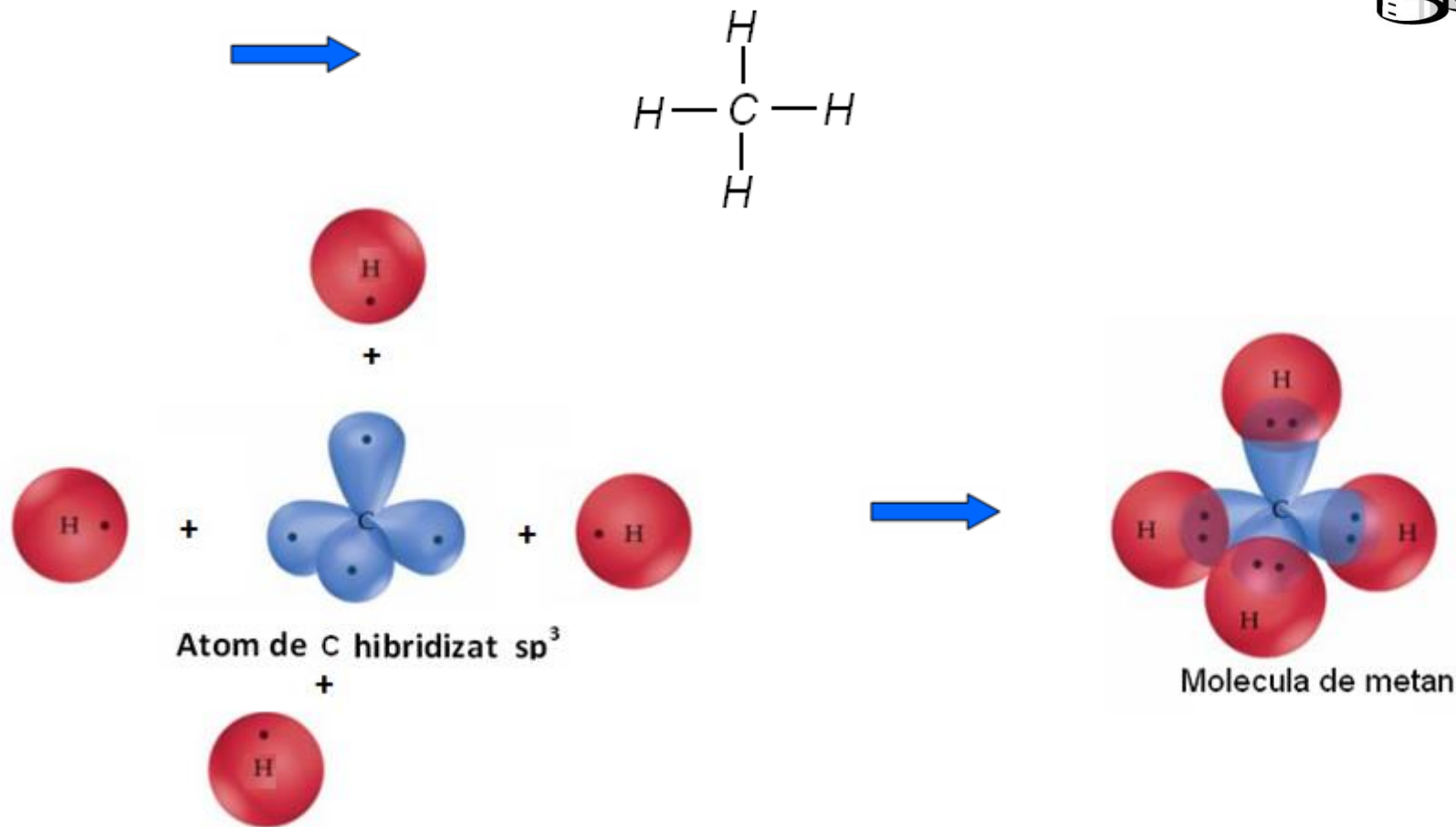



### Caracteristici:

- este cea mai puternică dintre legăturile covalente;
- tăria sa depinde de măsura în care se întrepătrund orbitalii atomici;
- legăturile  $\sigma$  stabilite prin orbitali hibridi sunt mai puternice decât cele realizate prin orbitali puri;
- legăturile  $\sigma$  sunt dirijate în spațiu; ele au orientarea orbitalilor atomici folosiți de atomul central la formarea moleculei.
- legăturile  $\sigma$  formează „scheletul rigid” al moleculei - distanțele interatomice rămân practic constante la modificarea stării de agregare a substanței.



Ex: Formarea legăturilor  $\sigma$  în molecula de metan:  $CH_4$



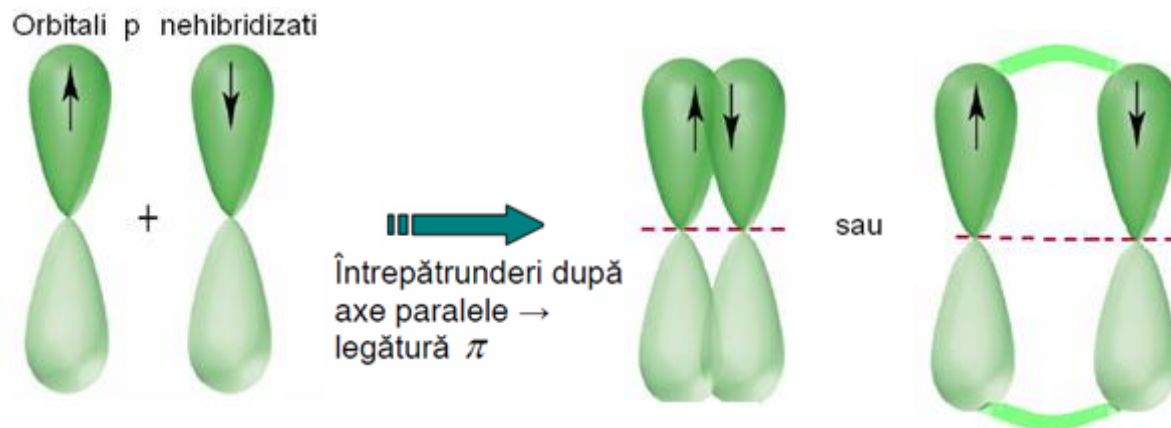
- în acest caz, atomul de C urmează să se lege de alți 4 atomi, deci el este hibridizat  $sp^3$ , așadar el are 4 orbitali hibridi  $sp^3$
- ei se întrepătrund cu orbitalii s ai atomilor de H  legături  $\sigma$  între atomii de H și cel de C.

## 2. Legătura $\pi$

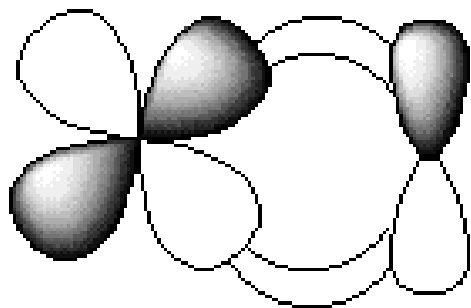


• **Legăturile  $\pi$**  se formează prin suprapunerea după direcții paralele a orbitalilor atomici puri ai atomilor parteneri. Orbitalii își suprapun câte 2 lobi, **fără modificarea formei acestora**. Există deci legături  $\pi_{p-p}$ ,  $\pi_{p-d}$ ,  $\pi_{d-d}$ .

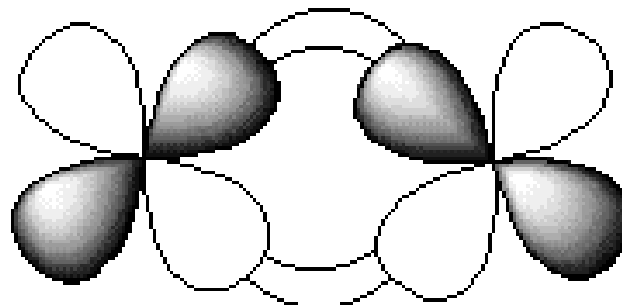
- Leg.  $\pi_{p-p}$ :



- Leg.  $\pi_{p-d}$ :



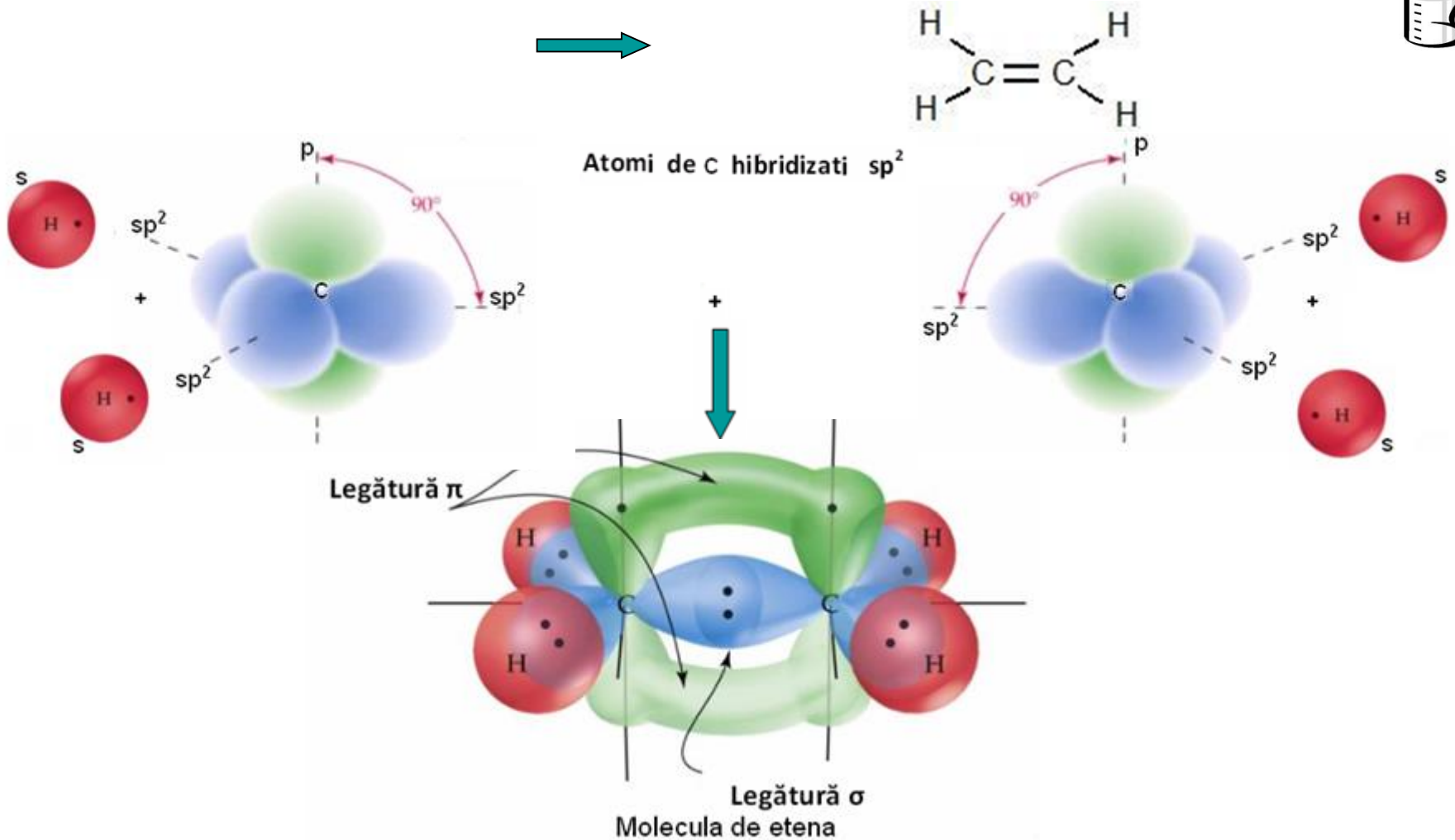
Leg.  $\pi_{d-d}$ :





- participarea orbitalilor  $f$  la formarea legăturilor este destul de puțin probabilă, deoarece pătura  $f$  este o pătură profundă a fiecărui înveliș electronic.
- formarea legăturilor  $\pi$  într-un ansamblu de atomi dați nu modifică scheletul construcției; *ea scurtează distanțele interatomice și împiedică rotația liberă a atomilor în jurul axei legăturii  $\sigma$ .*
- legătura  $\pi$  este mai slabă decât legătura  $\sigma$ :  $E_{\pi} < E_{\sigma}$

Ex. 1: Formarea legăturii duble în molecula de etenă:  $C_2H_4$



- în acest caz, atomii de C urmează să se lege de alți 3 atomi, deci ei sunt hibridizati  $sp^2$ , așadar au câte 3 orbitali hibridi  $sp^2$  și câte 1 orbital  $p$  pur
- 2 dintre orbitalii hibridi  $sp^2$  se suprapun direct formând legătura  $\sigma$  dintre atomii de C
- ceilalți orbitali hibridi  $sp^2$  formează legăturile  $\sigma$  cu atomii de H
- orbitalii  $p$  puri ai atomilor de C se suprapun după axe paralele, formând legătura  $\pi$  dintre atomii de C



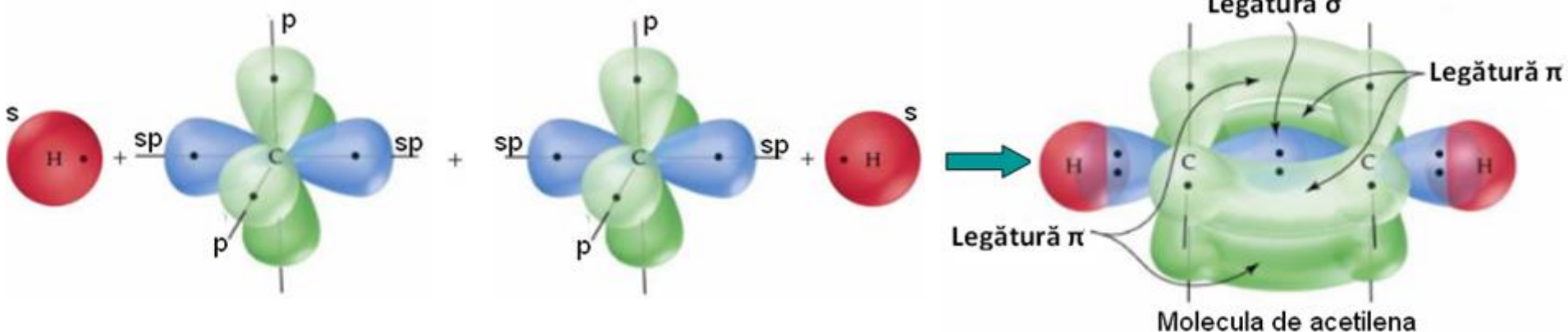
Leg. dublă între atomii de C: 1  $\sigma$  + 1  $\pi$



Ex. 2: Formarea legăturii triple în molecula de acetilenă:  $C_2H_2$ .



Atomi de C hibridizati  $sp$



- în acest caz, atomii de C urmează să se lege de alți 2 atomi, deci ei sunt hibridizati  $sp$ , așadar au câte 2 orbitali hibridi  $sp$  și câte 2 orbitali  $p$  puri;
- ei își suprapun coliniar câte un orbital hibrid  $sp \rightarrow$  leg.  $\sigma$  dintre atomii de C;
- ceilalți orbitali hibridi  $sp$  vor forma legăturile  $\sigma$  cu atomii de H;
- orbitalii puri de tip  $p$  se suprapun după axe paralele  $\rightarrow$  2 legături  $\pi$  între atomii de C;
- atomii de C vor fi **legați triplu**: 1 leg.  $\sigma$  + 2 leg.  $\pi$ .

**Obs:**

- Densitatea electronică a legăturilor  $\pi = \max.$  în două plane  $\perp$  unul pe altul.
- Electronii  $\pi$  sunt mai mobili decât electronii  $\sigma$ , iar dubletul lor e mai ușor de desfășurat  $\rightarrow$  ei participă primii la reacțiile chimice.

## Bibliografie:

- [http://www.unibuc.ro/prof/urda\\_a/docs/2013/oct/23\\_14\\_58\\_06curs\\_1\\_-\\_legaturi\\_hibridizare\\_polaritate.pdf](http://www.unibuc.ro/prof/urda_a/docs/2013/oct/23_14_58_06curs_1_-_legaturi_hibridizare_polaritate.pdf) - adaptare figuri
- <https://www.youtube.com/watch?v=925P6EYSnwY> – adaptare figuri
- <https://www.youtube.com/watch?v=Br2qjSdB8Lw> - film hibridizarea orbitalilor
- <https://www.youtube.com/watch?v=Bs83HGzSRJo> – film orbitalii molecul. benzen

