

Lotura kobalentea (I)



Lan hau Creative Commons-en Nazioarteko 3.0 lizentziaren mendeko Azterketa-Ez komertzial-Partekatu lizentziaren mende dago.
Lizentzia horren kopia ikusteko, sartu <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/es/> helbidean.

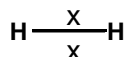
7. Lotura kobalentea (I)

Atomo ez-metalikoek molekulak eta ioiak era ditzakete **lotura kobalentearen** bidez. Molekulak egitura-unitate diskretoak dira zeinetan atomoen kopurua jakina den. Hots, Cl_2 eta HCl bezalako molekula diatomiko sinpleen izaera lotura kobalentearen bidez azal daiteke eta bai milaka atomo dituzten molekula konplikatuena ere (esaterako, proteina batzu). Kapitulu honetan, molekula sinpleak zein konplikatuak azaltzeko beharrezko kontseptuak aurkeztuko ditugu zenbait ereduren bidez. Halaber, ioi polinuklearretaz ere arduratuko gara, kargatutako molekulatza joko ditugu eta.

Lehendabizi garatuko dugun eredu **elektroi-bikoteen bidezko loturarena** da, zortzikotearen arauan eta Lewis-en egituretan oinarritzen dena. Ondoren, **BGEBA** teoriaren bidez, molekulen estereokimika azaltzen saiatuko gara, atomo zentralaren inguruko elektroi-bikoteak espazioan kokatuz (BGEBA izenak balentzia-geruzako elektroi-bikoteen arteko aldarapena esangura du). Bestalde, alderdi hauek guztiak orbital atomikoen erabilerarekin bateratuko dugu balentzia-loturaren teorian (**BL** teorian).

1. Elektroi-bikoteen bidezko lotura

Elektroi-bikoteen bidezko loturaren ereduaren mamia lotura kobalentea elektroi-bikoteen partekatzean datzela onartzea da. Kasurik sinpleenean, H_2 molekula diatomikoan, elektroi-bikote bakarra dugu (1s elektroi biez osatutakoa) zeinak bi nukleo erakartzen dituen. Horrela, atomo biek lotura kobalentearen bidez elkarrekin diraute (1. irudia).

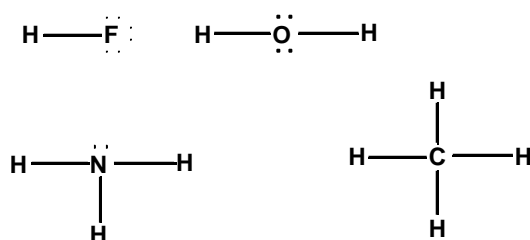


1.irudia. Elektroi-bikotearen bidezko lotura H_2 molekulan

1.1. Zortzikotearen araua eta Lewis-en egiturak

Elektroi-bikotea partekatzean H atomo biak bi elektroiz inguratuta daude, He gas noblearen konfigurazio egonkorra lortu izango balute bezala. H atomoak izan ezik, gainontzeko p blokeko elementuek ere zortzi elektroi behar dituzte ns^2np^6 gas noblearen konfigurazio lortzeko. Horrela, hiru balentzia-elektroi dituzten 13. taldekoei bost elektroi falta zaizkie zortzikotea lortzeko; lau balentzia-elektroi dituzten 14. taldekoei lau falta zaizkie; hiru balentzia-elektroi dituzten 15. taldekoei, hiru; sei balentzia-elektroi dituzten 16. taldekoei, bi eta zazpi balentzia-elektroi dituzten 17. taldekoei, bat. Lewis-en **zortzikotearen arauaren** arabera, atomoak zortzikotea betetzen saiatzen dira elektroi-bikoteak partekatuz; hau da, lotura kobalenteak eratuz.

Idea sinple honen bidez, makina bat molekulen lotura azal daiteke. Adibidez, 2. irudian lau hidrurotako atomoen arteko loturak irudikatu dira: puntu-bikoteak partekatzen ez diren elektroi-bikoteak adierazten dituzte eta marratxoek, partekatzen direnak. Mota hauetakoak, molekulen **Lewis-en egiturak** dira.

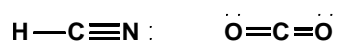


2.irudia. HF, H_2O , NH_3 eta CH_4 molekulen Lewis-en egiturak

Hidruro hauen Lewis-en egiturek ondokoa adierazten dute. C atomo isolatuari falta zaizkion lau elektroiak zortzikotea betetzeko, lau lotura kobalente eratuz lortzen ditu metanoan. Modu berean, amoniakoan (NH_3 hidruroan) N-ak hiru lotura eratzen ditu, H_2O hidruroko O-ak, bi lotura eta azido fluorhidrikoan (HF hidruroan) F-ak, lotura bat.

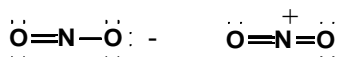
Diatomikoetan ezik, gainontzeko molekula poliatomikoetan **atomo zentrala** eta **muturreko atomoak** bereiztu beharra dago. Horrela, H_2O , NH_3 eta CH_4 molekuletan atomo zentralak O, N eta C dira (hurrenez hurren); H atomoak, berriz, muturrekoak dira kasu guztietan. Loturan parte hartzen ez duten elektroibikoteei, **bikote bakarti** deritze. Beraz, HF molekulan hiru bikote-bakarti daude F-aren inguruan, H_2O molekulan, bi bikote-bakarti O-aren inguruan eta NH_3 delakoan, bikote-bakarti bat N-aren inguruan.

Elektroibikote bakarra partekatzen denean, lotura **bakuna** dugu. Dena den, batzuetan bi eta hiru elektroibikote partekatu beharra sortzen da zortzikotearen araua bete dadin. Kasu hauetan lotura anizkoitzetaz hitz egiten dugu: bi elektroibikote partekatzen direnean **lotura bikoitza** dugu eta hiru elektroibikote partekatzen direnean, **hirukoitza**, hain zuzen ere. Adibide gisa, 3. irudian HCN eta CO_2 molekulen Lewis-en egiturak ikus daitezke. Hots, HCN molekulan C eta N atomoen arteko lotura hirukoitza da eta CO_2 delakoan, C eta O atomoen arteko lotura biak, bikoitzak dira.



3.irudia. HCN eta CO_2 molekulen Lewis-en egiturak

Lehenago aipatu bezala, ioi polinuklearrak molekula kargatutzat har daitezke eta, beraz, espezie hauetako lotura azaltzeko ere baliagarriak dira Lewis-en egiturak. Adibide gisa, 4. irudian, NO_2^- eta NO_2^+ ioien Lewis-en egiturak irudikatu dira.



4. Irudia. NO_2^- eta NO_2^+ ioien molekulen Lewis-en egiturak

Ikus daitekeenez, NO_2^- anioiko karga negatiboa oxigeno bati egokitu zaio eta NO_2^+ katioiko karga positiboa, nitrogenoari. Hau ulertzeko geroago azalduko dugun **karga formalaren** kontzeptua erabiliko dugu.

Lewis-en egiturak irudikatzeko hurrengo arauak hartu behar dira kontuan:

1. Molekularen atomo guztien balentzia-elektroiak zenbatu (anioia baldin bada, elektroibikote bat gehitu karga negatibo bakoitzeko eta katioia baldin bada, elektroibikote bat kendu karga positibo bakoitzeko).
2. Muturreko atomoen inguruan lau elektroibikote kokatu (H eta He elementuen inguruan elektroibikote bat).
3. Soberako elektroibikoteak geratuko balira, atomo zentralaren inguruan jarri.
4. Soberako elektroibikoterik ez badago, atomo zentralaren inguruan lau elektroibikote daudela konprobatu. Holan ez bada, lotura anizkoitzak proposatu atomo zentralaren inguruan

7. Lotura kobalentea (I)

Jarraian, pausu hauei jarraituz zenbait molekulen Lewis-en egiturak irudikatu ditugu.

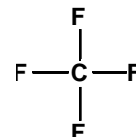
a) CF_4 molekularen Lewis-en egitura

1) $4C + 4 \times 7F = 32 \rightarrow 16$ elektro-bikote



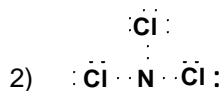
3) ez dago soberako elektro-bikoterik

4) atomo zentralaren inguruan, lau elektro-bikote daude; beraz,



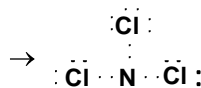
b) NCl_3 molekularen Lewis-en egitura

1) $5N + 3 \times 7Cl = 26 \rightarrow 13$ elektro-bikote



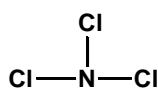
3) 12 elektro-bikote kokatuz gero,

elektro-bikote bat atomo zentralaren inguruan jarri



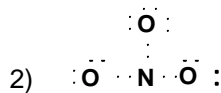
4) atomo zentralaren inguruan,

lau elektro-bikote daude; beraz, \rightarrow



c) NO_3^- anioiaren Lewis-en egitura

1) $5N + 3 \times 6O + 1 = 24 \rightarrow 12$ elektro-bikote



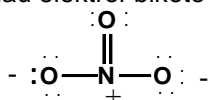
3) ez dago soberako elektro-bikoterik

4) lotura bikoitza bat falta da atomo zentralaren

inguruan lau elektro-bikote egon daitezen

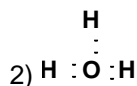


beraz,



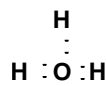
d) H_3O^+ katioiaren Lewis-en egitura

1) $6O + 3 \times 1H - 1 = 8 \rightarrow 4$ elektro-bikote



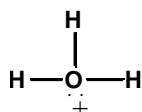
3) 3 elektro-bikote kokatuz gero,

elektro-bikote bat atomo zentralaren inguruan jarri



4) atomo zentralaren inguruan,

lau elektro-bikote daude; beraz, \rightarrow

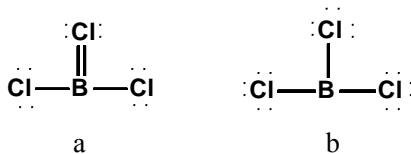


1.2. Karga formala

Aurreko kasu batzuetan, karga bat egokitu diegu atomoei. Esaterako, H_3O^+ katioian, karga positibo bat elkartu diegu oxigenoari. NO_3^- anioian, N-ari karga positibo bat egokitu diegu eta lotura bakunen bidez lotuta dauden bi O atomoei, karga negatiboa: horrela, orotara, karga negatibo bakarra elkartzen zaio ioiari. Lewis-en egituretan atomo bakoitzari elkartzen zaiona, **karga formala** (KF) da eta honela kalkulatzen da: loturen kopurua (LK) ken onartutako elektroien kopurua (OEK): hau da, $KF = LK - OEK$. Zer esanik ez, zortzikotearen araua betetzen bada, $OEK = 8 - BEK$ da, non BEK, balentzia-elektroien kopurua den. 5. Irudian, C, N eta O atomoen karga formala adierazi da zenbait egoeratan.

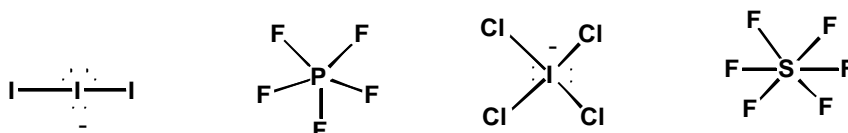
7. Lotura kobalentea (I)

BCl_3 molekulak (7. irudia) zortzikotearen araua bete dezan (a posibilitatea), B atomoak $\text{KF} = -1$ izango zuen eta lotura bikoitzeko Cl atomoak, $\text{KF} = 1$. Zer esanik ez, karga-banaketa hau atomo bien elektronegativitatearen kontra doa. Gainera, b posibilitatean karga formal guztiak nuloak dira. Beraz, nahiz eta B atomoaren inguruan hiru elektroibikote besterik ez egon, b posibilitatea jotzen da egokientzat.

7.irudia. BCl_3 anioiaren Lewis-en egiturak

Bestalde, atomo zentralaren inguruan lau elektroibikote baino gehiago dituzten makina bat molekula ezagutzen direla azpimarratu behar da. Hau dela eta, zortzikotearena ez da absolututzat har daitekeen araua. Molekula hauetan, atomo zentrala ez da bigarren periodokoa eta, horregatik, ns eta np orbitalak ez ezik, $(n-1)d$ orbitalak hartu behar dira kontuan. Hots, bigarren periodokoak (3d delakoak) hutsik egon arren, hirugarren energi mailatik aurrera d orbitalak egon badaude eta nahitaez erabili behar dira espezie hauetako loturak eratzeko.

Adibide gisa, 8. irudian I_3^- , PF_5 , ICl_4^- eta SF_6 espezieen Lewis-en egiturak irudikatu dira. (Beharrezkoa ez bada, hemendik aurrera muturreko atomoen inguruko elektroiak adieraziko ez direla esan beharra dago). Ikus daitekeenez, I_3^- eta PF_5 espezieetan, bost elektroibikote daude atomo zentralaren inguruan eta ICl_4^- eta SF_6 delakoetan, sei elektroibikote.

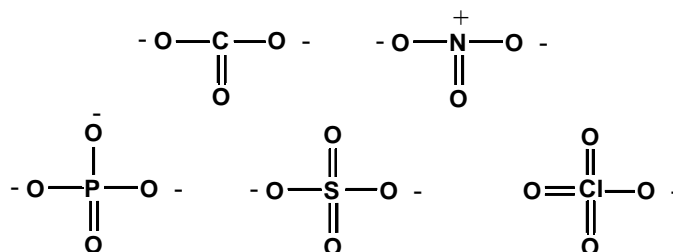
8. Irudia. I_3^- , PF_5 , ICl_4^- eta SF_6 espezieen Lewis-en egiturak

Espezie hauetan karga formala lehenago adierazitako modu berean kalkulatu da. Hots, I_3^- espeziean atomo zentralak bi lotura eratzen ditu ($\text{LK} = 2$) eta hiru elektroibikote ditu ($\text{OEK} = 3 = 10 - 7$, atomo isolatuak zazpi balentzia-elektroi dauzka eta molekula honetan hamar elektroibikote ditu inguruan). Beraz, $\text{KF} = 2 - 3 = -1$. ICl_4^- anioian, I atomoak lau lotura eratzen ditu ($\text{LK} = 4$) eta bost elektroibikote ditu ($\text{OEK} = 5 = 12 - 7$, atomo isolatuak zazpi balentzia-elektroi dauzka eta molekula honetan hamabi elektroibikote ditu inguruan). Beraz, $\text{KF} = 4 - 5 = -1$.

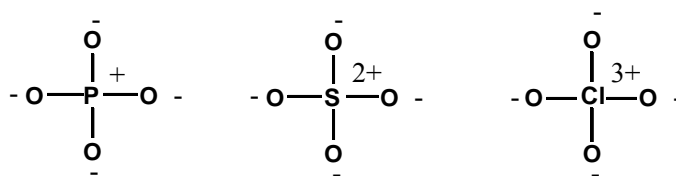
1.4. Erresonantzia

Karbonato, nitrato, fosfato, sulfato, eta perklorato anioien Lewis-en egituren bidez (9. irudia), azido karboniko, nitriko, fosforiko, sulfuriko eta perklorikoen egiturak ere azal daitezke. Horretarako, negatiboki kargatuta dauden oxigeno atomoen H atomo bat lotu besterik ez zaie egin behar

7. Lotura kobalentea (I)

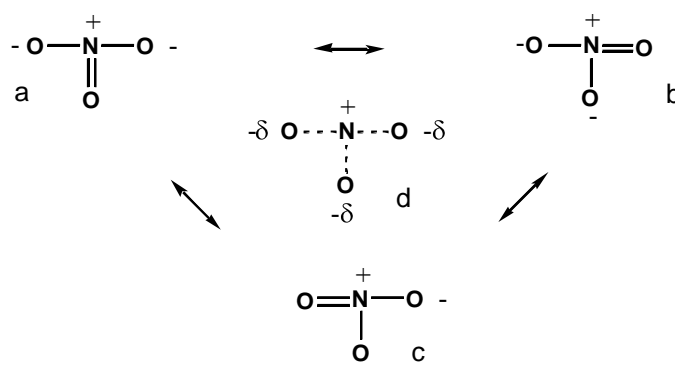
9.irudia. CO_3^{2-} , NO_3^- , PO_4^{3-} , SO_4^{2-} eta ClO_4^- anioien Lewis-en egiturak

Ikus daitekeenez, hirugarren periodoko atomo zentrala duten ioien egituretan (fosfato, sulfato eta perklorato anioietan, hain zuzen) ez da zortzikotearen araua betetzen. Hots, zortzikotearen araua betetzen diren SO_4^{2-} , PO_4^{3-} eta ClO_4^- anioien Lewis-en egiturak irudikatzea egon badago (10. irudian). Alabaina, egitura hauetan beharrezkoa ez den karga-banaketa azaltzen da elkartutako azidoen formazioarekin adostasunean ez dagoena.

10.irudia. PO_4^{3-} , SO_4^{2-} eta ClO_4^- anioien Lewis-en egitura ez egokiak

9. irudiko Lewis-en egitura ontzat onartuz gero, kontuan hartu beharreko beste datu experimentalak badago. Hots, CO_3^{2-} , NO_3^- , PO_4^{3-} , SO_4^{2-} eta ClO_4^- anioietan $\text{X}\cdots\text{O}$ (X =atomo zentrala) distantzia guztiak berdinak izateaz gain, ez dira $\text{X}\cdots\text{O}$ lotura bikoitzenak bezain laburrak eta ez $\text{X}\cdots\text{O}$ lotura bakunenak bezain luzeak. Zer esanik ez, datu experimental hauek azaltzerik ez dago 9. irudiko Lewis-en egituren bidez. Hots, aipatutako hauek Lewis-en egiturak eta errealitatea bat ez datozela aditzera emateko aukeratu ditugun zenbait adibide dira. Izan ere, konposatu mordoan dauzkagu teoria honen huts egiteak.

Azalpena eman nahian, **erresonantziaren** kontzeptua asmatu zen. Kontzeptu hau bikote-bakartien eta lotura anizkoitzen bikoteen mugikortasunean datza, muturreko ligandoak baliokideak (eta, beraz, distingaezinak) direnean. 11. irudian agertzen diren NO_3^- anioirako hiru posibilitateak (a, b eta c) nitratoaren hiru **egitura erresonanteak** dira eta guztiz baliokideak dira. Horrela, orotarako egitura (d) hiru **egitura erresonante hauen** batuketa da. Modu berean, PO_4^{3-} anioiak lau egitura erresonante ditu, bost oxigeno atomoak baliokideak baitira.

11.irudia. NO_3^- anioiaren Lewis-en egitura erresonanteak

Orotarako egituran lotura bakunei dagozkien hiru elektroi-bikoteetaz gain, laugarren bikotea dugu hiru N...O loturen artean partekatzen dena (hau adierazteko marra ez-etenen bidez irudikatu dira loturak). Hau dela eta, O atomei $-\delta$ ikurra egokitu zaie karga negatibo biak hiru oxigenoen artean banatzen delako. Beraz, karga partziala bateko balioa baino txikiagoa da: hain zuzen, $\delta=2/3$ da.

6. irudiko N_3^- eta NCO^- anioien Lewis-en egiturak ere erresonanteak dira elektroi-bikoteen desplazamenduaren bidez elkartuta baitaude. Izan ere, aziduroaren a egitura b egitura bien batuketa da. Zianatorako, a aukeratu badugu ere, lotura-distantziak azaltzeko b egitura ezin genuela erabat baztertu esan dugu. Hots, aurreko kasuetan (CO_3^{2-} , NO_3^- , PO_4^{3-} , SO_4^{2-} eta ClO_4^- direlakoetan) egitura erresonante guztiak baliokideak direnez, euren pisu portzentuala orotarako egituran bera da. N_3^- eta NCO^- anioien kasuetan, berriz, proposaturiko egitura erresonanteak pisu portzentual bera ez dutela onartu behar dugu. Horrela, erresonantziaren kontzeptua erabiliz, honela mintzatu behar gara: aziduroaren kasuan b egitura erresonanteak oso garrantzi txikikoak dira orotarako egituran (eta gauza bera, c egiturarako zianatoaren kasuan). Bestalde, zianatoan b egitura a delakoa baino garrantzi txikiagokoa izan arren beren pisu portzentuala orotarako egituran ezin da mexprezatu. Adibide hauen bidez, teoria eta ereduaren arteko eguneratzea ikus daiteke terminologiaren aldetik.

2. BGEBA teoria

Elektroi-bikoteen bidezko teorian atomoen arteko loturaren izaera azaltzen den arren, molekulen geometria aipatzen ez dela azpimarratu beharra dago. Betiko legez, jarraian adibide pare bat ikusiko ditugu teoria honen abiapuntua ulertu ahal izateko.

12. irudian, NO_2^+ eta NO_2^- ioien estereokimika ikus daitezke. Kasu bietan, N atomo bat eta bi O atomo egon arren, lehena lineala da eta bigarrena, angeluarra. Orduan, zelan azaldu ioi hauen geometria?



12. Irudia. NO_3^- eta PO_4^{3-} anioien Lewis-en egitura erresonanteak

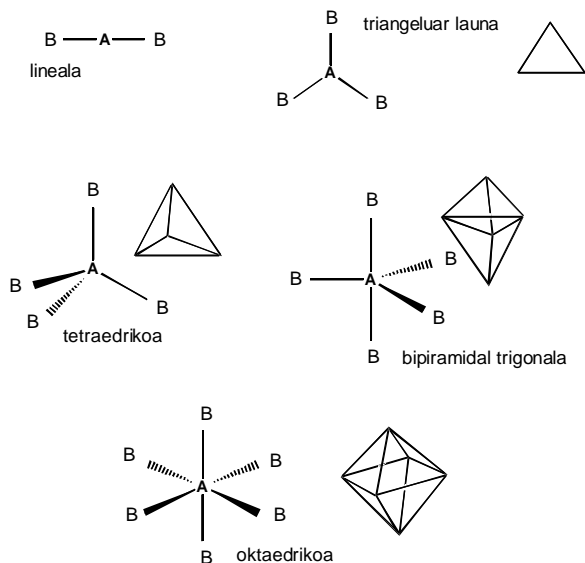
Ioi bietako elektroien kopurua desberdina izateaz gain (NO_2^+ katioiak 16 elektroi ditu eta NO_2^- anioiak, 18 elektroi), atomo zentralaren inguruko lau elektroi-bikoteen izaera ere desberdina da. Izan ere, NO_2^+ katioian lau bikoteak dira loturazkoak eta NO_2^- anioian, berriz, lauetatik bat bikote-bakartia da.

Balentzia-geruzako elektroi-bikoteen arteko aldarapenaren teoria (BGEBA delakoa) molekula eta ioien geometria azaltzeko garatutako eredu dugu. Teoria honen arabera, atomo zentralaren inguruko elektroi-bikoteek molekulen geometria determinatzen dute. Eredu hau 1949ean Sidwick-ek eta Powell-ek proposaturiko ideietan oinarritzen da zeinak 1977an Nyholm-ek eta, batez ere, Gillespie-k garatu zituzten. Horregaitik, eredu honi **Gillespie-ren eredu** ere deritzo.

Atomo zentralaren inguruko karga-banaketa faboragarria izan dadin, elektroi-bikoteen arteko aldarapenek ahalik eta txikienak izan behar dute eta, horretarako, elektroi-bikoteek hainbat geometriatan kokatuko dira beren kopuruaren arabera. Hots, atomo zentralaren inguruan bi elektroi bikote daudenean (AB_2) dudarik gabeko geometria faboragarria lineala da (13. irudian). AB_3 kasuan, berriz, hiru elektroi-bikoteak triangelu baten erpinetan kokatutuz lortzen da aldarapen minimoa. Halaber, atomo zentralaren inguruan lau (AB_4), bost

7. Lotura kobalentea (I)

(AB₅) eta sei (AB₆) elektro-bikote daudenean, geometria faboragarriak tetraedrikoa, bipiramide trigonala eta oktaedrikoa dira, hurrenez hurren.



13.irudia. Elektro-bikoteen banaketa espazial faboragarrienak

Banaketa-espazial hauetan oinarrituz, molekulen geometria auresaten du BGEBA metodoak. Horretarako, lotura anizkoitzak elektro-bikote bakartzat hartzen direla azpimarratu behar da. Jarraian, pausuz pausu helduko diegu molekulen geometria azaltzeari. Horretarako, 1. taulan adierazitakoa erabiliko dugu non X=lotura-bikotea eta E=bikote bakartia diren.

1. Taula. AB_n espezieen geometria X lotura-bikoteen eta E bikote-bakartien kopuruaren arabera

GEOMETRIA	AB _n MOTA	ADIBIDEAK
LINEALA	AX ₂	BeF ₂ (16 e-)
ANGELUARRA	AX ₂ E	O ₃ (18 e-)
ANGELUARRA	AX ₂ E ₂	OF ₂ (20 e-)
LINEALA	AX ₂ E ₃	XeF ₂ (22 e-)
TRIGONALA	AX ₃	BF ₃ (24 e-)
PIRAMIDE TRIGONALA	AX ₃ E	NF ₃ (26 e-)
T-FORMA	AX ₃ E ₂	ClF ₃ (28 e-)
	AX ₃ E ₃	(30 e-)
TETRAEDRIKOA	AX ₄	CF ₄ (32 e-)
TETRAEDRO DISTORTS.	AX ₄ E	SF ₄ (34 e-)
KARRATU LAUNA	AX ₄ E ₂	XeF ₄ (36 e-)
	AX ₄ E ₃	(38 e-)
BIPIRAMIDE TRIGONALA	AX ₅	PF ₅ (40 e-)
PIRAMIDE KARRATUA	AX ₅ E	ClF ₅ (42 e-)
	AX ₅ E ₂	(44 e-)
	AX ₅ E ₃	(46 e-)
OKTAEDRIKOA	AX ₆	SF ₆ (48 e-)

Ikus daitekeenez, bi muturreko atomo dituzten molekulak linealak (AX₂ eta AX₂E₃) eta angeluarrak (AX₂E eta AX₂E₂) izan daitezke; hiru muturreko atomo dituztenak, trigonalak (AX₃), piramide trigonalak (AX₃E) eta T-

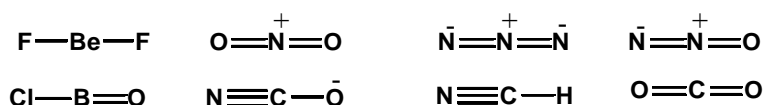
7. Lotura kobalentea (I)

formakoak (AX_3E_2) izan daitezke; lau muturreko atomo dituztenak, tetraedrikoak (AX_4), tetraedro distortsionatuak (AX_4E) eta karratu launak (AX_4E_2) izan daitezke; bost muturreko atomo dituztenak, bipiramide trigonalak (AX_5) eta piramide karratuak (AX_5E) izan daitezke eta sei muturreko atomo dituztenak, oktaedrikoak (AX_6) izan daitezke.

2.1. AB_2 espezieak

Bi muturreko atomo dituzten molekuletako atomo zentralaren inguruan bi elektro-bikote daudenean, biak lotura-bikoteak izango dira nahitaez eta, beraz, AB_2 molekulak 16 elektroiko AX_2 motakoak dira (BeF_2 bezalakoak). Metal lurralkalinoa bada ere, Be elementuak ez-metal modura jokatzeko du askotan eta bere kimika kobalentez jotzen da. Izan ere, BeF_2 ez ezik, $BeCl_2$, $BeBr_2$ eta BeI_2 molekula linealak eratzen dituzten zortzikotearen araua betetzen ez den.

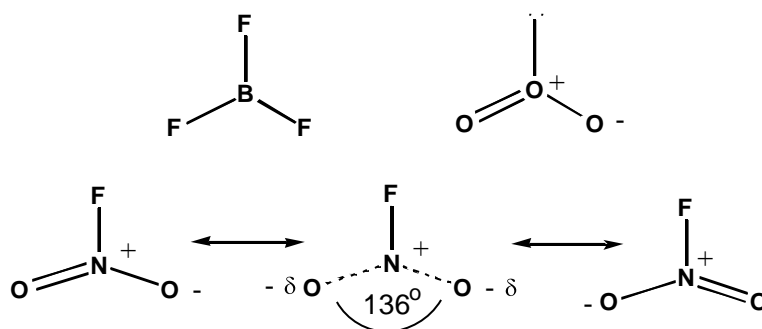
Lotura anizkoitzak elektro-bikote bakartzat jotzen direnez, 16 elektroiko NO_2^+ , N_3^- , N_2O , $BOCl$, NCO^- eta CO_2 espezieak ere AX_2 motakoak dira eta, beraz, BGEBA teoriaren arabera, linealak (errealitatearekin adostasunean). Zer esanik ez, muturreko atomoa H denean (HCN kasu), elektroien kopurua desberdina da. 14. irudian aipatutako espezieen egitura irudikatu da.

14. irudia. BeF_2 , CO_2 , NCO^- , N_3^- , NO_2^+ eta HCN espezie linealak

Elektroien kopuru bera duten espezieak **isoelektronikoak** dira eta, adibide askotan ikusiko dugunez, espezie isoelektronikoek geometria bera izaten dute.

2.2. AB_3 espezieak

Atomo zentralaren inguruan hiru elektro-bikote daudenean (AB_3) bi posibilitate agertzen dira (15. irudia). Hiruak lotura-bikoteak baldin badira (AX_3), 24 elektroiko molekula triangeluarra izango ditugu BF_3 , BCl_3 , BBr_3 eta BI_3 bezalakoak. Bestalde, bikote bat bakartia baldin bada, 18 elektroiko AX_2E molekula angeluarra izango da bikote-bakartia triangeluaren erpin batean kokatuta baitago. Mota hauetako adibidea ozonoa (O_3) eta nitritoa (NO_2^-) ditugu.

15. irudia. BF_3 eta O_3 molekulen egiturak

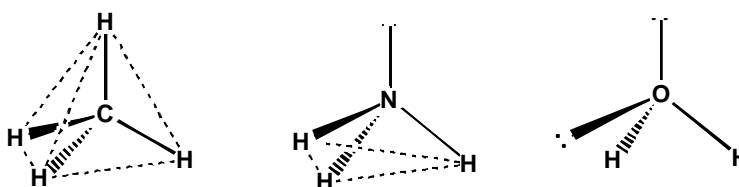
NO_2F eta NO_2Cl espezieak ere 24 elektroiko molekulak dira baina euren geometria ez da triangelu perfektu bati dagokiona. Hots, 15. irudian ikus daitekeenez, molekula hauetarako bi egitura erresonante proposatzen

7. Lotura kobalentea (I)

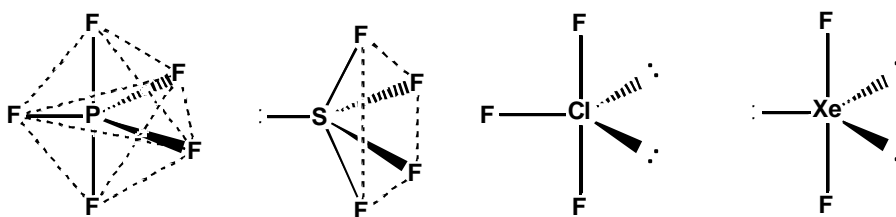
dira lotura bikoitzako elektroibikotea O atomo batetik bestera desplazatuz. Orotarako egitura N...O loturaren izaera, bakunaren eta bikoitzaren artekoa izango da eta O atomo bakoitzari $-\delta$ karga egokitzen diogu (kasu honetan, $\delta=0.5$). Hitz batean, N...O loturetan elektroibikote eta erdia partekatzen dela onartzen dugu. Hau dela eta, elkarri gehien aldaratzen dioten elektroibikoteek N...O loturakoak dira eta beraz, O-N-O angelua triangelu perfektu bati dagokiona (120°) baino handiagoa da (136°).

2.3. AB₄ espezieak

Atomo zentralaren inguruan lau lotura-bikote daudenean (AX₄), 32 elektroiko molekula tetraedrikoak izango ditugu: CF₄, CCl₄, CBr₄, Cl₄ eta BF₄⁻ espezieak, esaterako. Elektroibikoteetatik bat bakartia denean (AX₃E), molekularen geometria piramide trigonala da eta NF₃, NCl₃ eta PF₃ bezalako espezie hauek 26 elektroi dituzte. Azkenek, bi bikote-bakarti daudenean (AX₂E₂), molekula angeluarra da. Espezie hauen adibide gisa 20 elektroiko OF₂ eta SF₂ molekulak aipa daitezke. Muturreko atomoak H baldin badira, elektroien kopurua desberdina dela gogoratu behar da. Hots, CH₄ eta NH₄⁺ espezieak tetraedrikoak dira, NH₃ eta H₃O⁺ direlakoak, piramide trigonala eta H₂O eta NH₂⁻, angeluarrak. 16. irudian, CH₄, NH₃ eta H₂O molekulen geometria ikus daitezke.

16. irudia. CH₄, NH₃ eta H₂O molekulen geometria2.4. AB₅ espezieak

AB₅ motako 40 elektroiko molekulak bipiramide trigonala dira: adibidez, PF₅, PCl₅ eta AsF₅. Bikote bakartiak daudenean, bipiramide trigonalean erpin guztiak baliokideak ez direla izan behar da kontuan. Izan ere, plano ekuatorialean X-A-X angelua 120° da eta leku axialetan, 90° . Beraz, leku axialetako bikoteen arteko aldarapena, ekuatorialetako artekoa baino handiagoa da eta, horren ondorioz, muturreko atomo axialak gehiago urruntzen dira atomo zentralatik. Lotura-bikoteek baino aldarapen handiagoa eragiten dutenez, bakartiak bipiramide trigonalaren leku ekuatorialean kokatzen dira. Hau dela eta, AX₄E motako molekulak (34 elektroi) piramide karratuak dira, AX₃E₂ motakoak (28 elektroi), T-formakoak eta AX₂E₃ motakoak (22 elektroi), linealak. Espezie hauen adibideak ondokoak ditugu: SF₄ eta SeF₄ molekulak piramide karratuak dira, ClF₃ eta BrF₃, T-formakoak eta I₃⁻ eta XeF₂, linealak. 17. irudian PF₅, SF₄, ClF₃ eta XeF₂ molekulen geometria ikus daitezke.

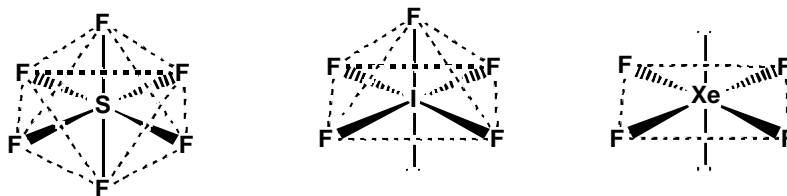
17. irudia. PF₅, SF₄, ClF₃ eta I₃⁻ espezieen geometria

7. Lotura kobalentea (I)

Bipiramide trigonaleko posizioak baliokideak ez direnez, muturreko atomoak berdinak ez direnean elektronegativitatea izango dugu kontuan atomoen kokapena ulertzeko. Izan ere, atomo elektronegatiboak leku axialetan kokatzen dira dentsitate elektronikoa atomo zentralatik urruntzen baitute. Hots, F atomoa Cl delakoa baino elektronegatiboagoa denez, 40 elektroiko Cl_4FP molekulan F atomoa leku axial batean dago eta ClF_4P , $\text{Cl}_2\text{F}_3\text{P}$ eta $\text{Cl}_3\text{F}_2\text{P}$ espezieetan Cl atomoak posizio ekuatorialetan kokatzen dira.

2.5. AB_6 espezieak

Atomo zentralaren inguruan sei lotura-bikote daudenean (AX_6) 48 elektroiko molekula oktaedrikoa da; adibidez, SF_6 , SeF_6 , TeF_6 eta PF_6^- espezieak. Bikote-bakartia dagoenean (AX_5E), 42 elektroiko molekulak izango ditugu zeinen adibideak ClF_5 , BrF_5 eta IF_5 diren. Bi bikote-bakarti daudenean, molekula karratu launa da bikoten arteko aldarapena ahalik eta txikien izan dadin (18. irudia). Mota honetako espezieek 36 elektroiti dituzte: XeF_4 eta ICl_4^- , esaterako.



18. irudia. SF_6 , IF_5 eta XeF_4 espezieen geometria

2.6. Bestelakoak

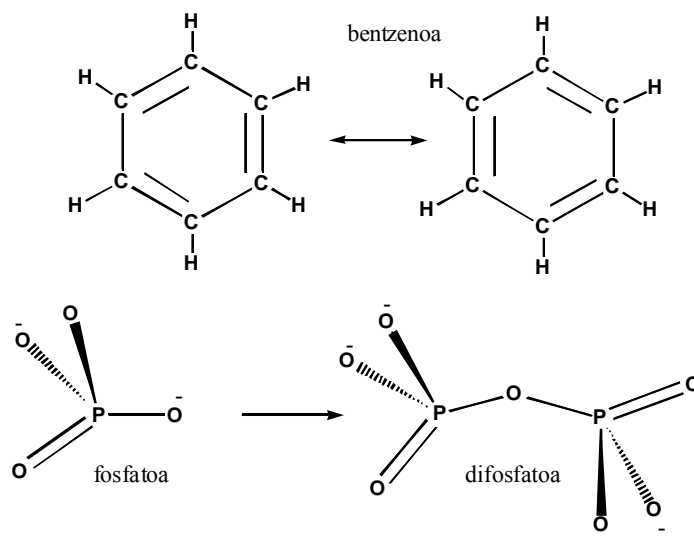
1. taulan AX_n espezieak agertzen dira non $n \leq 6$ den. Izan ere, $n > 6$ balioko oso espezie gutxi ezagutzen dira. Baten bat aipatu nahian, IF_7 molekula dugu zeinen geometria bipiramide pentagonala den. Halaber, ikus daitekeenez, AX_3E_3 (30 elektroiti), AX_4E_3 (38 elektroiti), AX_5E_2 (44 elektroiti) eta AX_5E_3 (46 elektroiti) molekula-motetarako adibiderik ez dago zeren eta halako espezierik ezagunak ez diren.

2.7. Molekula konplexuagoak

Lewis-en egiturak, erresonantziaren kontzeptua eta BGEBA metodoa erabiliz, molekula eta ioi askoren lotura eta geometria azal daitezke. Ikusitako adibideetaz gain, molekula eta ioi konplexuagoak ere deskriba daitezke. Horrela, hidrokarburoetan C atomoak lau lotura eratzen dituen ingurune tetraedrikoa du, lotura bikoitza bat eta bi lotura bakuna eratzen dituen ingurune trianguluarra eta lotura hirukoitza bat eta lotura bakuna bat eratzen dituen ingurune lineala.

19. irudian bentzeno, fosfato eta pirofosfato espezieen egiturak adierazi dira. C atomo bakoitzaren inguruko geometria trianguluarra denez, bentzenoa (C_6H_6) molekula hexagonala da. Bestalde, C-C distantzia guztiak berdinak direla azaltzeko, bi egitura erresonante proposatzen dira bentzenorako. Difosfatoaren geometria azaltzeko, fosfatoarena irudikatzea da komeni da, tetraedrikoa dena. Horrela, difosfatoa erpin bat (O atomo bat) partekatzen duten bi tetraedroz osatuta dago. Amankomuneko O atomo hau ingurune anguluarra du H_2O molekulan bezala. Zer esanik ez, fosfatoaren $\text{P}\cdots\text{O}$ lotura guztiak baliokideak direnez, kasu honetan ere egitura erresonanteak proposa daitezke.

7. Lotura kobalentea (I)

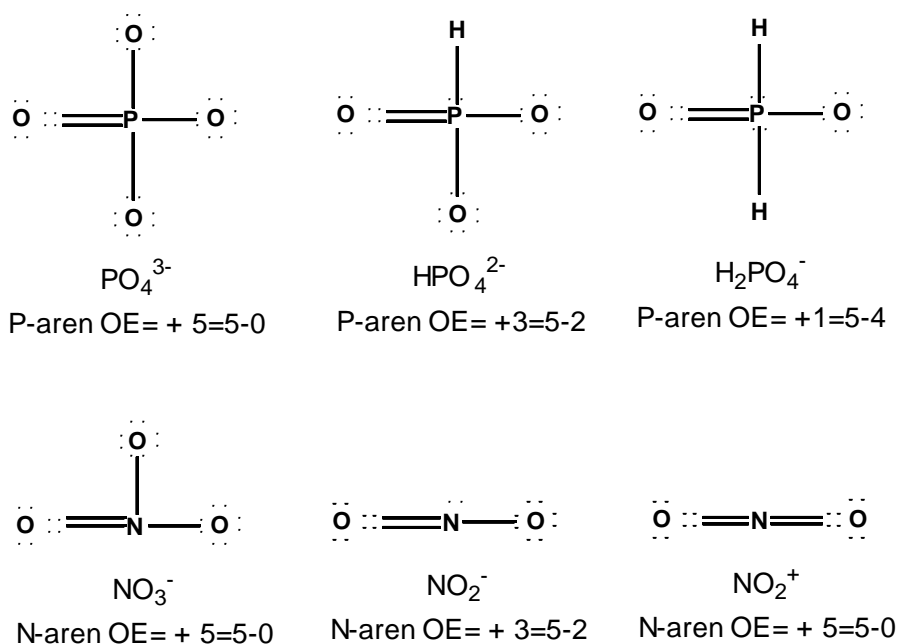


19. irudia. Bentzeno, fosfato eta difosfato espezieak

2.8. Oxidazio-egoera

Molekuletako atomoen karga formalaz gain, beste kontzeptu erabilgarri bat elkartzen zaie: alegia, **oxidazio-egoera**. Oxidazio-egoera kalkulatzeko, partekatzen diren elektroiak atomo elektronegatiboek bereganatzen dituztela onartzen da. Horrela, oxidazio-egoera (OE) honela kalkulatzen da: $OE = EK_i - EK_m$ non EK_i atomo isolatuak dituen elektroien kopurua den eta EK_m atomoak molekulan dituen elektroien kopurua den. Uraren molekulan, adibidez, oxigenoak zortzikotea bereganatzen duela suposatuz, $EK_m = 8$ da. O atomoaren balentzia-elektroien kopurua sei denez, $EK_i = 6$ da eta, beraz, oxidazio-egoera $OE = 6 - 8 = -2$ da. Modu berean, H atomoetarako $EK_i = 1$ eta $EK_m = 0$ direnez, $OE = +1$ da.

20. irudian hiru fosfoanioi ikus daitezke. Kasu guztietan O atomoen oxidazio-egoera -2 da $P \cdots O$ eta $N \cdots O$ loturetako elektroiak O atomoak bereganatzen dituela onartzen baita



20. irudia. Atomo zentralaren oxidazio-egoera (OE)

7. Lotura kobalentea (I)

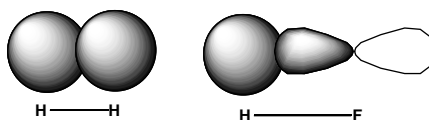
Orduan, fosfato ioian (PO_4^{3-}), P-aren oxidazio egoera $5-0=+5$ da. Fosfitoan (HPO_3^{2-}), berriz, P atomoari $\text{P}\cdots\text{H}$ loturaren elektroibikotea elkartzen zaionez, oxidazio-egoera $5-2=+3$ da. Bestalde, hipofosfitoan (H_2PO_2^-), P atomoak $\text{P}\cdots\text{H}$ lotura bien elektroibikoteak bereganatzen dituela onartzean, P-aren oxidazio egoera $5-4=+1$ da. Nitrato ioian (NO_3^-) eta nitronio katioian (NO_2^+) N-aren oxidazio-egoera $+5$ da partekatzen diren elektroiguztiak O atomoek bereganatzen baitu. NO_2^- Nitrito anioian, berriz, N-aren inguruan bikote-bakarti bat dagoenez, oxidazio-egoera $+3$ da.

Zer esanik ez, atomo guztien oxidazio-egoeren batuketa espeziearen karga da (espeziea molekula bada, nuloa eta ionikoa bada, positiboa katioietarako eta negatiboa anioietarako). Hots, PO_4^{3-} kasuan, $-3=5_P+4\cdot(-2)_O$ eta H_3PO_4 kasuan, $0=5_P+4\cdot(-2)_O+3\cdot 1_H$.

3. Balentzia-loturaren teoria

Orain arte, molekulen lotura eta estereokimika deskribatzeko ez ditugu orbitalak aipatu. Hau da, aurreko ereduek ez dute adierazten partekatzen diren elektroiak zeintzu diren eta non daude kokatuta molekuletan. Zer esanik ez, molekulak bere osotasunean deskribatu ahal izateko informazio hau dugu premiazko. Orbitaletan aritzen bagara, euren esangura fisikoa ezin dugu ahaztu. Hain zuzen ere, orbital batek espazioko zonalde bat definitzen du non elektroia aurkitzeko probabilitatea maximoa den eta elektroiak energia jakina duen.

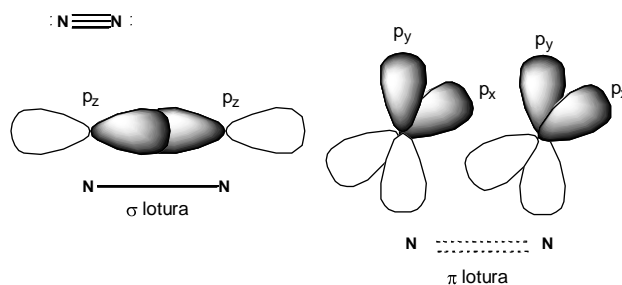
Molekula diatomikoen kasuan, orbitalen erabilerak erraza dirudi lotura bakunak daudenean. H_2 molekulan, esaterako, lotura-bikoteko elektroibiak $1s$ direnez, $1s$ orbital biak gainezarrita daudela onartzen da (21. irudia). Horrela, nukleo bien artean amankomuneko zonalde bat dago non elektroibikotea aurki daitekeen. Modu berean, HF molekulan, H-aren $1s$ orbitala eta F-aren $2p_z$ delakoa elkarri gainezarriko zioten lotura sorrarazteko. Gainezarketa zuzen hauei σ **lotura** deritze eta kimikariok z norabidea lotura-norabidetzat onartzen dugula esan beharra dago.



21. irudia. H_2 eta HF molekuletarako orbitalen gainezarketa

Orbital atomikoen bidez lotura bakunak ez ezik, lotura anizkoitzak ere azaltzea dagoela ematen du molekula diatomikoetan. Adibide gisa, 22. irudian N_2 molekula diatomikoaren orbital atomikoak ikus daitezke. Hots, N atomoaren balentzia-konfigurazio elektronikoa $2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ denez, N_2 molekula deskribatzeko ondokoa proposa daiteke: $2p_z$ orbitalen gainezarketaren bidez, σ lotura bat lortzen da (elektroibikote bat). Lotura bikoitzari dagokion bigarren elektroibikotea $2p_y$ (edo $2p_x$) orbitalen gainezarketa ez-zuzenaren ondorioz suertatutako zonaldean kokatuko zen eta lotura hirukoitzari dagokion hirugarren elektroibikotea, $2p_x$ (edo $2p_y$) orbitalen gainezarketa ez-zuzenaren ondorioz suertatutakoan. Gainezarketa ez-zuzen hauei π **lotura** deritze. Horrela, N atomo bakoitzaren inguruan bi $2s$ elektroibikote geratuko ziren bikote-bakarti gisa.

7. Lotura kobalentea (I)

22. irudia. Orbital atomikoen gainezarketa N_2 molekulan

Era beran O_2 molekula diatomikoaren lotura bikoitza honela deskriba daiteke: $2p_z$ orbitalen arteko gainezarketaren bidezko σ lotura bat eta $2p_y$ (edo $2p_x$) orbitalen arteko gainezarketaren bidezko π lotura bat. Horrela, oxigeno atomo bakoitzaren inguruan $2s$ bikote-bakarti bat eta $2p_x^2$ (edo $2p_y^2$) bikote-bakarti bat daude, loturan pare hartzen ez dutenak, hain zuzen.

Molekulak bi atomo baino gehiago dituztenean, gauzak konplikutzen hasten dira: ikus ditzagun bi adibide. H_2O molekulan, bi $O\cdots H$ lotura bakuna daude. Beraz, batek O -aren $2p_z$ eta H atomo baten $1s$ orbitalen arteko σ lotura izan daiteke eta bestea, O -aren $2p_y$ eta beste H -aren $1s$ orbitalen arteko σ lotura. Horrela, O -aren bikote-bakartiak, $2s^2$ eta $2p_x^2$ izango ziren baina, $2p_z$ eta $2p_y$ orbitalak elkarri perpendikularrak direla jakina, zelan azaldu 104.5° -ko $H-O-H$ angelua? Izan ere, orbital atomikoen bidez erantzunik gabeko galdera dugu hau. Bestalde, galdera bera egin daiteke CH_4 molekulan. Hots, molekula honetako lotura azaltzeko $2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^0$ oinarritzko konfiguraziotik $2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ konfigurazio kitzikaturako aldaketa proposatu daiteke, horrela C -ak lau parekatu gabeko elektro lortzen dituelako. Dena den, $2s$ eta $2p$ orbitalen simetriak eta norabidenaltasunak oso desberdinak dira. Hain zuzen, $2s$ orbitala esferikoa da eta $2p$ direlakoak, ez. Gainera, hiru $2p$ orbitalak elkarri perpendikularrak dira. Beraz, orbital hauen bidez, zelan azaldu metanoaren geometria tetraedrikoa?

Galdera hauei erantzuna emateko, orbital atomikoen bidez eraikitako beste orbitalen bidezko ereduak landu behar izan ziren. Lehen ahaleginak, balentzia-loturaren teorian gauzatu zirenak, aurreko ereduetan proposaturikoa berreskuratzeko asmoz egin ziren. Aldi berean, askoz eredu batuagoa garatzen hasten zen: orbital molekularren teoria, hain zuzen ere. Atal honetan, balentzia-loturaren teorian ikusiko dugu, orbital molekularren teoria azaltzen hurrengo kapitulu osoan arituko gara eta.

BGEBA metodoaren arabera atomo zentralaren inguruko konfigurazioak molekularren estereokimika determinatzen du. Espezie askoren geometria auresateko hain arrakastatsua zen ideia hau dugu balentzia-loturaren teoriako abiapuntu. Izan ere, teoria honek **orbital hibrido**en eraketa proposatzen du atomo zentralaren orbital atomikoen konbinazioz.

3.1. Orbital hibridoak atomo hidrogenoideetan

Mekanika kuantikoan uhin-funtzio degeneratuak elkarrekin konbina daitezke. Lortutako uhin-funtzio berriak Schrödinger-en ekuazioaren emaitza baliagarriak direla eta aurrekoen energia dutela oroitu beharra dago. Horrela, atomo hidrogenoideetan n kuantu-zenbaki bereko orbitalak degeneratuak direnez, euren arteko konbinazio guztiak Schrödinger-en ekuazioaren emaitza baliagarriak dira. Jarraian, maila-bereko s , p eta d orbitalen arteko zenbait hibridazio-mota ikusiko ditugu.

3.1.1. sp hibridazioa

Energi maila jakin bateko s orbital bat eta p orbital bat konbinatuz, 1.ekuazioetako bi sp orbital hibrido lortzen dira zeinen uhin-funtzioak linealki independenteak eta normalizatuak diren.

$$\begin{aligned}\Psi_{sp+} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_s + \Psi_p) \\ \Psi_{sp-} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_s - \Psi_p)\end{aligned}\quad (1)$$

23. irudian ikus daitekeenez, sp orbital hibrido biek simetria esferikoa dute erabilitako p orbital atomikoaren norabidearekikoa: esaterako, p_z erabili bada, z ardatzarekikoa. Halaber, biek nodo-azal bat dute koordinatu-ardatzaren jatorrian. Bestalde, probabilitate maximoko zonaldeak kontrakoak dira.



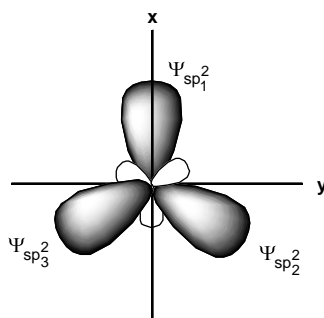
23. irudia. sp orbital hibridoak

3.1.2. sp^2 hibridazioa

2.ekuazioak energi maila jakin bateko s orbital baten eta bi p orbitalen konbinazioak adierazten dituzte: sp^2 orbital hibridoak.

$$\begin{aligned}\Psi_{sp_1^2} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \Psi_s + \frac{2}{\sqrt{6}} \Psi_{p_x} \\ \Psi_{sp_2^2} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \Psi_s - \frac{1}{\sqrt{6}} \Psi_{p_x} + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_{p_y} \\ \Psi_{sp_3^2} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \Psi_s - \frac{1}{\sqrt{6}} \Psi_{p_x} - \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_{p_y}\end{aligned}\quad (2)$$

Aukeratutako p orbitalak p_x eta p_y direnez, orbital hibrido hauen probabilitate maximoko zonaldeak xy planoan daude. Orbitalen lobuloak triangulu baten erpinetara abiatuta daude (24.irudia). Halaber, hiruak dute nodo-plano bat koordinatu-ardatzaren jatorrian.



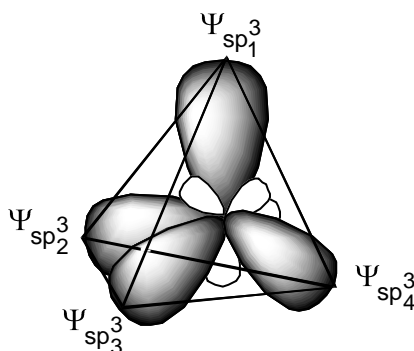
24. irudia. sp^2 orbital hibridoak

Egindako konbinazio linealetan Ψ_{p_x} uhin-funtzioaren ordean Ψ_{p_y} jarriko bagenu eta alderantziz, lortutako sp^2 orbital hibridoak baliokideak izango liriateke baina 90° -tan biratura (lehen a ardatzaren gainean egongo litzateke). Halaber, p_x eta p_y orbital atomikoak baino p_x eta p_z direlakoak konbinatuz, lortutako orbitalak ere baliokideak izango liriateke baina xz planoan. Modu berean, p_y eta p_z orbitalen konbinazioak, hiru sp^2 orbital hibrido sortertzatzen ditu yz planoan.

3.1.3. sp^3 hibridazioa

Lau orbital atomiko konbinatuz lau orbital hibrido sorrarazten direnez, s orbital bat eta hiru p orbital erabiliz lau sp^3 orbital hibrido lortzen dira. Orbital hauen lobuloak tetraedro baten erpinetara abiatuta egon daitezen egin beharreko konbinazioak 3.ekuazioetan adierazi dira. 25. irudian lau sp^3 orbital hauek irudikatu dira.

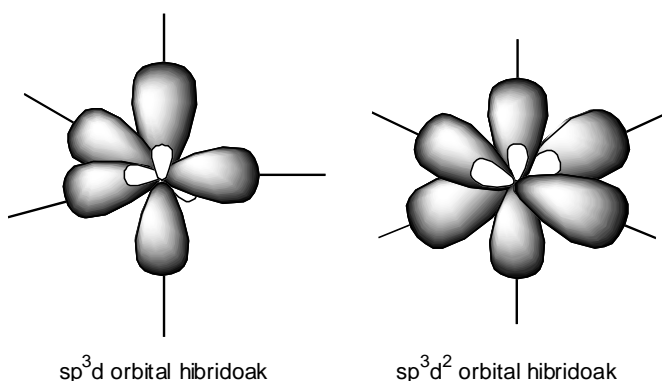
$$\begin{aligned}\Psi_{sp_1^3} &= \frac{1}{2}(\Psi_s + \Psi_{p_x} - \Psi_{p_y} + \Psi_{p_z}) \\ \Psi_{sp_2^3} &= \frac{1}{2}(\Psi_s - \Psi_{p_x} + \Psi_{p_y} + \Psi_{p_z}) \\ \Psi_{sp_3^3} &= \frac{1}{2}(\Psi_s - \Psi_{p_x} - \Psi_{p_y} - \Psi_{p_z}) \\ \Psi_{sp_4^3} &= \frac{1}{2}(\Psi_s + \Psi_{p_x} + \Psi_{p_y} - \Psi_{p_z})\end{aligned}\quad (3)$$



25. irudia. sp^3 orbital hibridoak

3.1.4. sp^3d^n hibridazioa

Hirugarren energi mailatik aurrera, d orbital atomikoak ere erabili daitezke sp^3d^n orbital hibridoak lortzeko. Horrela, konbinazio aproposak eginez bipiramide trigonal baten erpinetara abiatutako lobuloak dituzten bost sp^3d orbital hibrido zein oktaedro baten erpinetara abiatutako lobuloak dituzten sei sp^3d^2 orbital hibrido lor daitezke. 26. irudian orbital hauek irudikatu dira.



26. irudia. sp^3d eta sp^3d^2 orbital hibridoak

3.2. Orbital hibridoak atomo polielektronikoetan

Esan bezala, atomo hidrogenoideen n maila bereko orbital atomikoak degenaratuak dira. Hau dela eta, sp , sp^2 , sp^3 , sp^3d eta sp^3d^2 orbital hibridoen energia eta erabiliko orbital atomikoena bera da. Dena dela, atomo

polelektronikoetan n mailako orbital atomikoak ez dira degenaratuak eta, beraz, ezin dira konbinatu orbital hibridoak lortzeko. Orduan zelan lor daitezke orbital hibridoak atomo polielektronikoetan?

Hurbilketa orbitalaren metodoan (3.1.atala), orbital atomiko hidrogenoideak erabiltzen dira atomo polielektronikoen orbitala atomikoak kalkulatzeko. Hots, atomo polielektronikoen orbital hibridoak lortzeko gauza bera egiten da: hau da, orbital hibrido hidrogenoideak abiapuntutzat hartu eta, ondoren, orbital hibridoetako elektroiek jasaten duten karga nuklear eraginkorra determinatu. Horrela, orbital hibridoaren energia balioztatzen da

Orbital atomikoekin gertatzen den bezala, atomo hidrogenoideen eta polielektronikoen orbital hibridoaren itxura bera da. Halaber, mota bateko orbital hibridoak degeneratuak dira; esaterako, sp orbital hibrido bikoak energia bera dute, erabilitako s eta p orbital atomikoen bitartekoa.

3.3. Lotura-ordena

BGEBA teoriako terminologian lotura bakuna, bikoitza eta hirukoitza hitzak erabili ditugun bezalaxe, BL teoriarik σ eta π loturetaraz mintzatuko gara. Halaber, adibideetan ikusiko dugun bezala, BGEBA teoriarik erresonantziaren bidez azaldutako alderdiak, BL delakoan **deslekupenaren** kontzeptu berriaren bidez deskribatutako dira. Azken honi helduko dieguen lotura-ordena aipatuko dugu zeren eta elektroik-bikote bat bi nukleok baino gehiagok parteka dezaketen. Beraz, parametro hau definitzea komeni da (4. ekuazioa). Hots, lotura-ordena (LO) partekatutako elektroien kopurua (KEK) zati nukleoen kopurua (NK) da.

$$LO = \frac{KEK}{NK} \quad (4)$$

3.4. Orbital hibridoak eta estereokimika

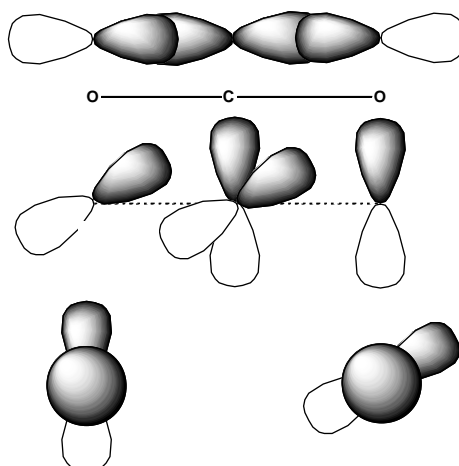
Orbital hibridoaren eredu hau ezin da BGEBA teoriatik banandu zeren eta proposatutako orbital atomikoen konbinazioak egiteko molekulen estereokimika alde aurretik jakin behar baita. Dena dela, loturaren irudi grafiko eta zuzena ematen digu eredu honek eta, horregatik, BGEBA metodoa oso erabilgarria da.

3.4.1. sp orbital hibridoak AB_2 molekuletan

Ikusi bezala, AX_2 espezieak linealak dira. Hauetarako atomo zentralaren sp hibridazioa proposatzen du balentzi-loturaren teoriak. Hots, BeF_2 molekulan bi σ lotura eratzen dira, Be-aren sp orbital hibridoaren eta F-aren $2p_z$ orbital atomikoen artekoak, hain zuzen.

Lotura anizkoitzak daudenean, π loturetaraz hitz egin behar dugu BL teoriarik. Horrela, 27. irudian ikus daitekeenez, CO_2 molekula honela deskribatzen da: bi $C \cdots O$ σ lotura (C-aren sp orbital hibridoaren eta O-aren $2p_z$ orbital atomikoen artekoak) eta bi $C \cdots O$ π lotura (C-aren $2p_y$ eta O baten $2p_y$ orbital atomikoen artekoa eta C-aren $2p_x$ eta beste O-aren baten $2p_x$ orbital atomikoen artekoa). Horrela, zortzi elektroik hartzen dute parte loturan. Gainontzekoak O atomoen inguruan geratzen dira.

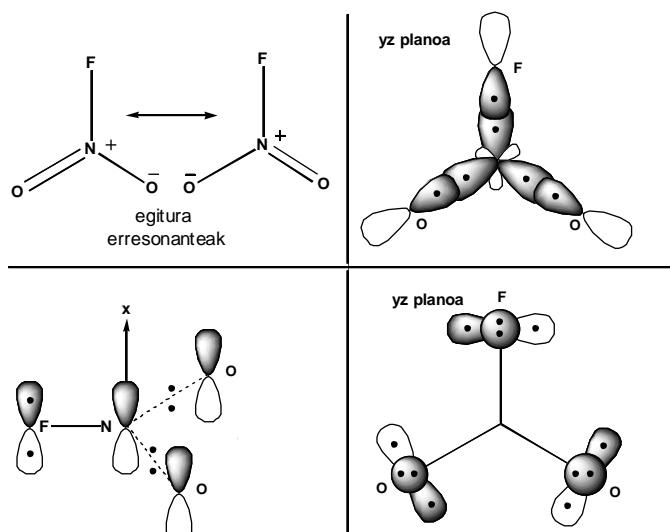
7. Lotura kobalentea (I)

27. irudia. BL teoriaren arabera CO₂ molekula

27. irudian, ezker aldeko O atomoaren p_y orbitala π lotura eratzeko erabiltzen da eta p_x delakoa, ez. Eskualdeko O atomoan, berriz, p_x orbitalak loturan hartzen du parte eta p_x delakoak, ez. Zer esanik ez, alderantzizko egoera hauxe bezain probablea dela onartu behar da. Hurrengo kapituluan molekula hau askoz hobeto deskribatuko dugu orbital molekularren bidez.

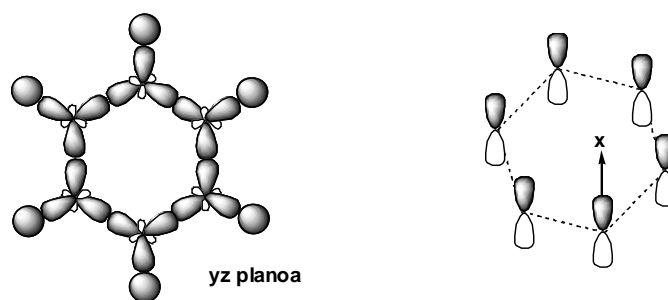
3.4.2. sp^2 orbital hibridoak AB₃ molekuletan

AB₃ molekuletarako sp^2 hibridazioa proposatzen du BL teoriak. BF₃ molekulan, beraz, hiru σ lotura daude. NO₂F (24 elektro) molekula deskribatzeko, bi N...O σ lotura (4 elektro), F...N σ lotura bat (bi elektro) eta N...O π lotura bat (2 elektro) proposatzen dira (28. irudia). Loturan parte hartzen duten 8 elektroiez gain, beste 14 elektro daude: hiru bikote F-aren inguruan eta lau bikote O atomoen inguruan. Azken hauetako bat O batetik bestera desplazatzen egon beharko zen π loturako bikotearekin batera. BGEBA metodoan, molekula honek bi egitura erresonante ditu N=O lotura bikoitza desplazatuz. Hots, BL teorian π elektro-bikotea **desleketua** dagoela esaten da. Horrela, hiru nukleoak (N atomoak eta O atomo biek) partekatzen dute π elektro-bikotea.

28. irudia. BGEBA eta BL teoriaren arabera NO₂F molekula

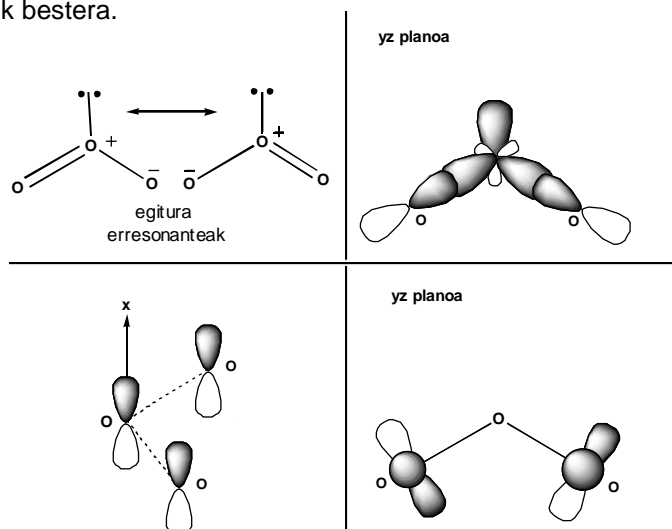
Era honetan, erresonantziaren ondorioz sortzen ziren δ karga partzialak erraz azal daitezke. Baina, horretarako, lotura-ordena kalkulatu behar dugu. Hots, N...O bi loturetan 6 elektroirik daude, 3 elektroirik loturako partekatzen dira eta, beraz, $3/2=1.5$ lotura-ordena dugu. Balio hau da O eta N atomoen karga formalak kalkulatzeko erabiliko duguna. Hain zuzen, N-aren karga formalak (1.2.atala) $2 \times 1.5 + 1 - 3 = +1$ da. Nitrogenoak 1.5-eko ordenako bi N...O lotura eratzeaz gain, 1-eko ordenako N...F lotura bat ere eratzen du (LK=4) eta 3 elektroirik onartzen ditu (OEK=3). O atomo bakoitzaren karga formalak, berriz, $1.5 - 2 = -0.5$ da. Beraz, honela kalkulaturako karga formalek δ karga partzialekin koinziditzen dute.

Bentzenoan (C_6H_6 , 30 balentzia-elektroi), C atomo guztietarako sp^2 hibridazioa proposatzen da (29. irudia). Horrela, C eta H atomoen artean sei sp^2-s σ lotura (12 elektroirik) daude eta sei sp^2-sp^2 π lotura, C atomoen artean (12 elektroirik). Gainontzeko sei elektroirik π lotura deslektutan daude sei karbono atomoen artean. Horrela, orotara, hamazortzi elektroirik daude C...C loturetan eta hamabi C...H loturetan; beraz, C...C loturako hiru elektroirik daude eta 1.5eko lotura-ordena dago. Halaber, C...H loturen ordena 1 denez, C atomo bakoitzak $1.5 \times 2 + 1 = 4$ lotura eratzen ditu, BGEBA metodoeraekin adostasunean.



29. irudia. BL teoriaren arabera bentzeno molekula

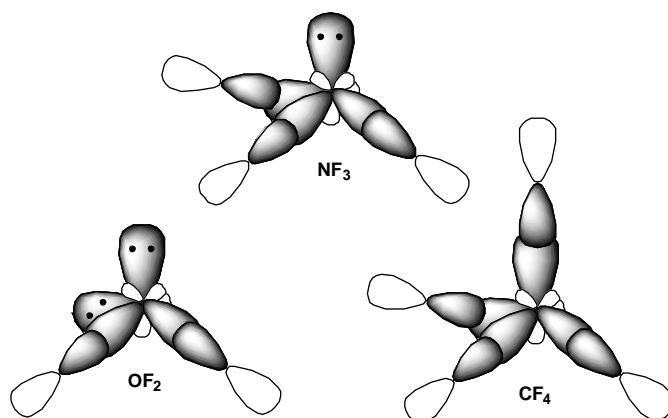
AB_3 motako AX_2E molekula angeluarrak deskribatzeko, bikote-bakartia sp^2 orbital hibrido batean kokatua dagoela onartzen du BL teoriak. Horrela, O_3 molekulan (30. irudia) honako loturak proposatzen dira: bi O...O σ lotura (4 elektroirik), O...O...O π lotura deslektu bat (2 elektroirik), bikote-bakarti bat atomo zentralaren inguruan (2 elektroirik) eta loturan parte hartzen ez duten 10 elektroirik. Hauetako bi π loturako bikotearekin batera desplazatu behar da O atomo batetik bestera.



30. irudia. BGEBA eta BL teoriaren arabera O_3 molekula

3.4.3. sp^3 orbital hibridoak AB_4 molekuletan

AX_4 molekula tetraedrikoak sp^3 hibridazioaren bidez deskribatzen dira. CF_4 molekulan, adibidez, lau C...F s lotura proposatzen dira C-aren sp^3 orbital hibridoen eta F atomoen p_z orbital atomikoen artean. PO_4^{3-} , SO_4^{2-} eta ClO_4^- bezalako espezie tetraedrikoak deskribatzeko 3d orbitalak hartu behar dira kontuan π loturak azaltzeko. AX_3E molekula piramidalak eta AX_2E_2 molekula angeluarrak ere, sp^3 hibridazioaren bidez azal daitezke bikote-bakartiak sp^3 orbital hibridoetan kokatuz. 31. irudian, CF_4 , NF_3 eta OF_2 molekulak BL teoriaren arabera ikus daitezke.



31. irudia. BL teoriaren araberako OF_2 , NF_3 eta CF_4 molekulak

3.4.4. sp^3d^n orbital hibridoak AB_5 molekuletan

Aurreko kasuetan bezalaxe, AX_5 , AX_4E , AX_3E_2 eta AX_2E_3 molekuletarako atomo zentralaren sp^3d hibridazioa proposatzen da eta AX_6 , AX_5E eta AX_4E_2 molekuletarako, sp^3d^2 hibridazioa.