



O Conceito de Hibridização

Joanna Maria Ramos, Antônio Orlando Izolani, Claudio Alberto Téllez e Maria Josefa Gomes dos Santos

Discute-se no seguinte artigo as formas de apresentar o conceito de “hibridização” em diferentes textos de química geral de uso universitário. Conclui-se que nenhum dos exemplos é satisfatório, porquanto o enfoque é superficial e não explica as razões conceituais e experimentais que levaram à formulação de dito conceito. No artigo, apresentam-se os argumentos consistentes que conduzem à definição mais formal e completa do conceito de hibridização.

► orbitais atômicos, hibridização, modelo conceitual ◀

Recebido em 10/10/06, aceito em 7/3/08

Pelo fato de o conceito de hibridização ser apresentado em diferentes textos de ensino universitário com enfoques diferentes, incompleto e sem a profundidade necessária para seu total entendimento – e muitas vezes com a aparência de mero recurso de memorização, usando um modelo atômico estático –, temos como objetivo na seguinte discussão sobre o conceito de hibridização apresentá-lo de forma mais abrangente, indicando os pontos controversos e/ou omissos nos textos universitários.

O uso de recursos gráficos – tais como usar gaiolas em ordem, tantos quanto o número quântico principal indica para a camada eletrônica – conduz à apresentação de um modelo estático de átomo com elétrons orbitais (modelo de N. Bohr), resultando a hibridização numa mera acomodação do elétron numa outra posição dentro do esquema das gaiolas. A apresentação do conceito dessa forma não está de acordo com o modelo mecânico-quântico, cuja característica principal é o dinamismo do sistema atômico.

Os textos escolhidos para a análise do conceito de hibridização são

de uso comum nas universidades brasileiras. A escolha de outros textos de Química Geral não foi necessária, porquanto em todos eles se notou a mesma metodologia para a apresentação do conceito.

Distribuição eletrônica

A idéia do conceito de hibridização, que nos foi entregue pelos autores de grande parte dos textos de química geral, tem, como no caso do conceito de orbital, um abuso invocando fins didáticos que distorcem o verdadeiro sentido do conceito. Para ilustrar a idéia da distribuição eletrônica, vejamos, por exemplo, os modelos de diagramas, tais como casas separadas acomodando dois elétrons em cada uma delas, seguindo os princípios de Hund e Pauli. No texto *Introdução à Química Geral* de Ohlweiler (1978, p. 110), encontra-se o vício da simplificação para articular o modelo de casas com elétrons como, por exemplo, para o oxigênio, a configuração eletrônica é: $1s^2 2s^2 2p^4$, no qual os quatro elétrons $2p$ podem distribuir-se aleatoriamente nos orbitais $2p_x$, $2p_y$ e $2p_z$. O modelo apresentado por Ohlweiler (1978) é apresentado na Figura 1.

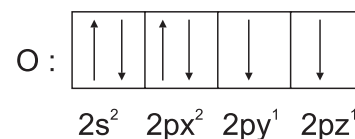


Figura 1: Diagrama de flechas para preenchimento de elétrons nos orbitais s e p de acordo com Ohlweiler (1978).

Brady e Humiston (1994), no seu texto de *Química Geral* (p. 165), coloca a estrutura eletrônica da camada do oxigênio conforme a Figura 2.

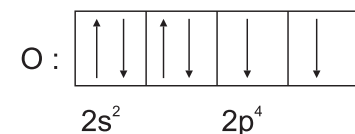


Figura 2: Diagrama de flechas para preenchimento de elétrons nos orbitais s e p de acordo com Brady e Humiston (1994).

O mesmo diagrama é apresentado no texto de *Química Geral Superior* de Masterton e Slowinski (1990, p. 214).

Ao compararmos o mesmo modelo apresentado por diferentes autores, podemos perguntar: já que cada orbital aceita dois elétrons com spins opostos, por que no átomo de oxigênio os elétrons não emparelha-

dos apresentam a distribuição dos spins opostos em posições distintas? E ainda, por que, no modelo apresentado por Ohlweiler (1978), o par de elétrons compartilhado no orbital $2p$ cai no $2p_x$? Por que não no $2p_y$ ou $2p_z$? Esses orbitais não são por acaso equivalentes no espaço? Existe alguma razão para a preferência pelo orbital $2p_x$?

Nos modelos de Brady e Humiston (1994) e naquele de Masterton e Slowinski (1990), essa dificuldade é omitida, e podemos supor que os autores pensaram que cada um dos orbitais $2p_x$, $2p_y$ e $2p_z$ tem a mesma probabilidade de serem preenchidos de acordo a regra de Hund.

Em princípio, podemos aceitar esse tipo de simplificação, mas devemos alertar o estudante da falha que eles trazem. Quando essas idéias são apresentadas de forma rígida, sem discussão, devemos pensar também que, além de não sabermos responder por que a diferença no posicionamento do spin dos elétrons entre uns e outros autores, não devemos considerar a ocupação no orbital $2p_x$ como o sítio preferencial para a ocupação dos elétrons nos orbitais p . Também devemos refletir que existe uma tendência no próprio modelo (tal como no modelo de Lewis) de manter os elétrons engaiolados, distorcendo assim a característica fundamental da sua dinâmica.

Hibridização

O conceito de hibridização foi explicado pelo professor Ohlweiler (1978, p. 110) no texto *Introdução à Química Geral* mostrando que o átomo de carbono é tetravalente, pois se encontra excitado, e por esse motivo deve transferir um dos seus elétrons para o orbital p vazio. Por sua vez o professor Pauling (1972, p. 246) introduz o conceito de hibridização mostrando que ele é possível por meio da combinação linear entre os orbitais s e p do carbono de forma a obter ligações mais fortes que as ligações

simples entre um orbital s e um orbital p , sem considerar a hibridização, e representa a hibridização sp^3 como a combinação linear das funções de ondas dos orbitais (Equação 1).

$$\Psi = a \phi_s + b \phi_{p_x} + c \phi_{p_y} + d \phi_{p_z} \quad \text{Eq. 1}$$

A ilustração de Masterton e Slowinski no seu texto de *Química Geral* (1990, p. 186) é: orbitais sp^3 . O fato de o átomo de carbono formar quatro ligações covalentes poderá ser

explicado considerando que, *antes da reação*, um dos elétrons $2s$ é promovido ao subnível $2p$ (Figura 3).

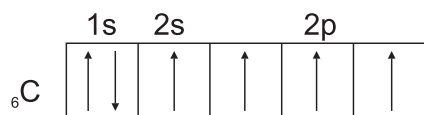


Figura 3: Um dos elétrons $2s$ é promovido ao subnível $2p$, de acordo com Masterton e Slowinsky (1990).

Agora que o átomo de carbono tem quatro elétrons desemparelhados, ele pode formar quatro ligações covalentes, compartilhando elétrons com outros átomos (Figura 4) tais como os de hidrogênio.

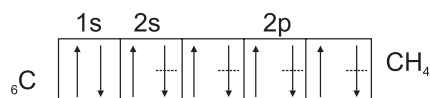


Figura 4: Formação de quatro ligações covalentes compartilhando elétrons com outros átomos, de acordo com Masterton e Slowinsky (1990). As retas tracejadas indicam os elétrons fornecidos pelo hidrogênio.

A versão de Bueno e colaboradores (1981) no texto *Química Geral* (p. 125) é a seguinte: "por exemplo, o átomo de carbono tem a seguinte estrutura eletrônica: $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^0$. Esta estrutura admite que o metileno (CH_2) deveria ser estável, enquanto o metano (CH_4) teria ligações CH com energias diferentes entre si. Estes fatos não ocorrem normalmente, mas, se um elétron do nível $2s$ é promovido ao nível $2p$ vazio,

tem-se uma reorganização destes orbitais formando quatro orbitais de uma mesma energia".

A versão de Coulson (1953) no seu texto *Valence* (p. 237) é a seguinte: "o estado mais baixo do carbono é $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$, o qual tem dois elétrons não compartilhados e é descrito espectroscopicamente como um tripleto 3P . Tal átomo de carbono seria divalente, com ângulo entre as ligações, semelhante ao ângulo encontrado na molécula de água. A única forma de obter a tetravalência é excitar o átomo, tomando um dos elétrons $2s$ e levando-o ao orbital $2p_z$ totalmente vazio, para dar $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$, temos então quatro elétrons não compartilhados, isto é, um estado 5S . A energia para tal excitação está ao redor de 96 Kcal/mol, existindo acordo entre o cálculo e o experimento".

Com esse tipo de excitação, conseguimos quatro elétrons desemparelhados, mas não obtemos quatro tipos de orbitais idênticos para cada elétron. Três deles são do tipo p e o outro é do tipo s . Já que os orbitais p possuem caráter direcional, e no orbital s essa característica está ausente, obtemos um ângulo de 90° para as ligações $p-p$, e um ângulo de $125^\circ 14'$ para as ligações $s-p$.

Esse tipo de estrutura geométrica é incongruente para o caso particular do CH_4 . Experimentalmente tem-se demonstrado que, entre as quatro ligações do átomo central de carbono, existe um ângulo de $109^\circ 28'$. Esse tipo de evidência conduz a pensar em uma mistura dos orbitais p e s , criando o conceito de orbitais "híbridos". No caso do metano, essa mistura inclui um orbital s e três orbitais p , denominando-se comumente hibridização sp^3 .

Wiberg, no seu texto *Physical Organic Chemistry* (1964, p. 169), faz menção aos artigos de Pauling (1928; 1931) e de Slater (1931) e proporciona na discussão a mesma argumentação de Coulson (1953), acrescentada de um tratamento matemático mais rigoroso. Segundo Pauling e Slater, a natureza da ligação química observada no CH_4 pode explicar-se supondo que os orbitais híbridos podem ser formados por

meio de combinações lineares entre os orbitais s e p . Esses orbitais podem ser descritos como:

$$\Psi_1 = a_1 s + b_1 p_x + c_1 p_y + d_1 p_z \quad \text{Eq. 2a}$$

$$\Psi_2 = a_2 s + b_2 p_x + c_2 p_y + d_2 p_z \quad \text{Eq. 2b}$$

$$\Psi_3 = a_3 s + b_3 p_x + c_3 p_y + d_3 p_z \quad \text{Eq. 2c}$$

$$\Psi_4 = a_4 s + b_4 p_x + c_4 p_y + d_4 p_z \quad \text{Eq. 2d}$$

As contribuições dos caracteres s e p ao orbital híbrido são de $\frac{1}{4}$ e $\frac{3}{4}$ respectivamente.

Temos uma relação geométrica entre esses orbitais híbridos. A parte s não tem efeito sobre a geometria por ser totalmente esférica – a direcionalidade invocada por Coulson, (1953) – e Ψ_1 contém a soma de três orbitais p . Qual-

quer ponto sobre o eixo do orbital descrito por Ψ_1 será equidistante dos eixos $+x$, $+y$ e $+z$. Similarmente, para Ψ_2 , um ponto sobre o eixo do orbital será equidistante de $+x$, $-y$, e $-z$ etc. Isso pode ser visualizado considerando que, no centro de um cubo, está a origem dos eixos coordenados. Direcionando os orbitais, obtemos, então, uma distribuição tetraédrica para os orbitais híbridos sp^3 , ilustrada na Figura 5.

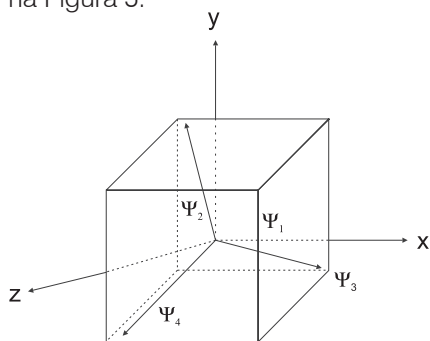


Figura 5: Relação entre as diferentes funções de onda sp^3 .

Vejamos se já podemos tirar alguma conclusão do que foi visto até agora. De Ohlweiler (1978), podemos concluir que existe certo grau de concordância com os outros autores, quando manifesta a noção de orbital híbrido introduzido por L. Pauling. Notamos, porém, alguns pontos

obscuros e discutíveis: a) os elétrons s não são transferidos para orbitais p ; b) a função de onda $\Psi = a \phi_s + b \phi_{p_x} + c \phi_{p_y} + d \phi_{p_z}$ implica só uma das componentes para o orbital híbrido; c) não temos condições ou restrições aos coeficientes a , b , c e d .

Masterton e Slowinski (1990), ao explicarem a hibridização, põem em manifesto a idéia de uma reação química como meio de ter o átomo de carbono em um estado excitado. Aqui, o conceito de *átomo excitado* está mais bem colocado que no caso de Ohlweiler (1978). Os pontos discutíveis são: a) os elétrons não são promovidos ao nível $2p$; b) o es-

quema dos elétrons em gaiolas ou celas não ilustra o orbital híbrido e não explica a hibridização.

Por seu lado, Bueno e colaboradores (1981) manifestam

idéias de razão estrutural e energética; *promove* elétrons como os outros autores; e novamente não distinguimos o porquê de os orbitais $2p_x$ e $2p_y$ predominarem perante o orbital $2p_z$ para serem preenchidos com elétrons.

De Coulson (1953), concluímos que as razões energética, espectroscópica e geométrica impossibilita aos orbitais híbridos do carbono terem uma estrutura diferente que a de uma orientação espacial tetraédrica. Como no caso dos outros autores, dá preferência aos orbitais $2p_x$ e $2p_z$ para serem preenchidos com elétrons.

A versão de Wiberg (1964) é a mais rigorosa. Além das razões energética, espectroscópica e geométrica, aponta a argumentação matemática de Pauling e Slater. Usa lamentavelmente o termo *promovido* ao se referir a um rearranjo de elétrons diferente ao do estado de equilíbrio.

Admitimos nesta discussão como lógicos os argumentos energéticos, espectroscópicos, geométricos e matemáticos dados por Coulson

(1953) e Wiberg (1964) – adotados parcialmente pelos outros autores citados – e que traduzem as idéias de Pauling e Slater. Faltaria explicar o caso no qual o átomo de carbono assume a sua potencialidade tetra-valente, quando está frente a algum tipo de excitação de tipo externo. Por exemplo, frente à presença de um campo que perturbe o seu sistema de equilíbrio fundamental. Essa idéia foi descrita por Masterton e Slowinski (1990) quando falaram de reação química (entre outros autores) no seu texto de *Química Geral*. Pensamos, então, que a presença do fator perturbação induz ao átomo de carbono a possuir um estado energético, cuja descrição no âmbito da teoria é feita por meio de uma função de onda “orbital híbrido”. Para diferentes graus de excitação, teremos diferentes formas de distribuir essa tetra-valência. E a cada uma dessas formas corresponderão orbitais híbridos diferentes, que são: sp^3 , sp^2 e sp .

Finalmente, quando criticamos o fato da “promoção de elétrons”, o fazemos no sentido de alertar que a imagem projetada é a de elétrons “pulantes”, e que está em contradição com a característica de movimentos oscilatórios do elétron, em que, em um movimento ondulatório com maior comprimento de onda, se pode atingir estados de energia mais elevados. E também ao fato de que a densidade da probabilidade, na qual os elétrons podem tomar outros limites, está fora da densidade de probabilidade de equilíbrio. A idéia de salto de elétron

traduz uma trajetória retilínea, o que é proibido na mecânica quântica. Como um todo, o átomo pode adquirir qualquer um dos seus estados energéticos possíveis. O elétron “pulante” dá a idéia de corte (ou ampu-

tação) de uma parte do conjunto, sendo que todo o sistema é aquele que sofre a perturbação e não só uma parte dele. Demos também outro sentido a essa última frase dizendo que os estados energéticos que se

Existe certo grau de concordância de alguns autores quando manifestam a noção de orbital híbrido introduzido por Pauling.

O motivo energético, espectroscópico e geométrico impossibilita aos orbitais híbridos do carbono terem uma estrutura diferente que a de uma orientação espacial tetraédrica.

conhecem comumente nos átomos denominam-se orbitais, e os trânsitos eletrônicos devidos à perturbação do sistema conduzem ao posicionamento eletrônico diferente ao da situação de equilíbrio. Existem também no átomo os estados energéticos híbridos de elevada instabilidade e que são espectroscopicamente observados. Esses estados se estabilizam na formação da ligação química com a participação de outros átomos.

Como comentário final, queremos indicar que no transcurso da discussão usamos a palavra “orbital” no sentido de que o leitor está familiarizado com ela e com o significado desse conceito. Os orbitais, no sentido matemático, são as representações gráficas das funções de onda. O leitor pode encontrar as equações matemáticas que representam tais funções nos textos de físico-química de Atkins e de Paula (2004, p. 415) ou no de mecânica-quântica de Hanna (1966, p. 182).

Agradecimentos

J. M. Ramos e C. Téllez agradecem ao CNPq pelas bolsas recebidas.

Joanna Maria Ramos (joannamaria@uol.com.br), mestre em Química pela UFF, doutoranda em Química Inorgânica pela PUC-Rio. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro – PUC-Rio.

Antônio Orlando Izolani (antonio.izolani@uss.br), mestre em Química pela PUC-Rio, doutor em Geoquímica pela UFF, é professor da Universidade Severino Sombra, Vassouras-RJ. **Maria Josefa Gomes**

dos Santos (claudiogiron@bol.com.br), doutora em Química, professora da Universidade Estadual de Londrina – UEL. **Claudio Alberto Téllez** (tellez@vm.uff.br), mestre em Filosofia com menção em Química pela Universidade de Chile (UCH), doutor em Ciências Naturais pela Universidade de Dortmund, Alemanha, é professor de Química Inorgânica na UFF.

Referências

ATKINS, P. e DE PAULA, J. *Físico-Química*. v. 2. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2004.

BRADY, J.E. e HUMISTON, G.E. *Química Geral*. 2 ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 1994.

BUENO, W.A.; BOATS, J.F.C.; DEGREVE, L.; LEONE, F.A. *Química Geral*. São Paulo: McGraw-Hill. 1981.

COULSON, C.A. *Valence*. Oxford: Oxford University Press, 1953.

HANNA, M.W. *Quantum Mechanics in Chemistry*. New York: W. A. Benjamin. 1966.

MASTERTON, W.L.; SLOWINSKI, J. *Princípios de Química*. 6 ed. Rio de Janeiro: Guanabara, 1990.

OHLWEILER, O.A. *Introdução à Química Geral*. Porto Alegre: Globo, 1978.

PAULING, L. *Química Geral*. Rio de

Janeiro: Ao Livro Técnico, 1972.

PAULING, L. The nature of the chemical bond: Application and results obtained from the quantum mechanics and from a theory of paramagnetic susceptibility to the structure of molecules. *Journal American Chemical Society*. v. 53, p. 367, 1931.

SLATER, J.C. Directed Valence in Polyatomic Molecules. *Physical Review*. v. 37, 481, 1931.

WIBERG, K.B. *Physical Organic Chemistry*. New York: Wiley, 1964.

Para saber mais

PESSOA JR.,O. A Representação Pictórica de Entidades Quânticas da Química. *Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola*, v. 7, p. 25-33, 2007.

Abstract: *The Hybridization Concept.* In the present paper we discuss the different ways to introduce the hybridization concept which are given in several university texts of general chemistry. We conclude that there is not an appropriate position to introduce this concept which appears to be superfluous, and the authors of the general chemistry texts do not explain which ideas and/or experimental and theoretical results constitute the conceptual basis to introduce the concepts of hybridization. In this paper we present a consistent argument necessary to carry out a more complete and formal conceptualization of hybridization.

Keywords: atomic orbital, hybridization, conceptual models

Nota

O Ministério da Educação lançou neste ano o Portal do Professor, um novo espaço de colaboração que ajudará o professor a enriquecer suas aulas. Neste portal eletrônico, o professor encontra sugestões de aulas, discussões de temas ligados à educação, recursos educacionais multimídia (arquivos de áudio, vídeo e imagens, animações, simulações, experimentos e mapas), cursos, materiais de estudo para o professor, *chats*, fóruns e *blogs* e *links* para bibliotecas, dicionários, museus, entre outros.

Estão sendo formados cerca de 20 mil professores em alfabetização digital e este número deve chegar a 250 mil nos próximos 3 anos.

Acesse o portal do professor por:

<http://portaldoprofessor.mec.gov.br>

Luciana Caixeta Barboza
Gerente editorial de QN&Esc



Portal do Professor
Espaço de acesso público