

Química Orgánica

Como sabemos la complejidad y la variabilidad de las moléculas de los compuestos orgánicos se basa en la capacidad del átomo de carbono para combinarse consigo mismo para formar cadenas carbonadas que pueden ser lineales, ramificada, cíclica o en forma de jaula y a las que se unen otros elementos fundamentalmente hidrógeno, oxígeno, nitrógeno, azufre, fósforo y algunos metaloides y metales.

Los enlaces existentes entre el carbón tanto consigo mismo como con los demás elementos se realizan a través de enlaces covalentes, teniendo algunas excepciones.

Según la teoría de Lewis acerca de el enlace químico, los átomos tiene una tendencia a completar su último nivel energético alcanzando la similitud de un gas noble lo que les confiere gran estabilidad pues completan el octeto. El H, por tener electrones sólo en el orbital 1s, tiende a completar un par electrones.

La explicación de la facilidad del átomo de C para formar enlaces covalentes puede hallarse en el examen de su estructura electrónica que es la siguiente:

$1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^0$

Los orbitales se representan por círculos y están situados en orden creciente de energía. Los electrones se representan flechas dentro de los círculos. Cuando en un orbital hay dos electrones, estos deben estar apareados, es decir, deben tener espines opuestos. Esto se representa por

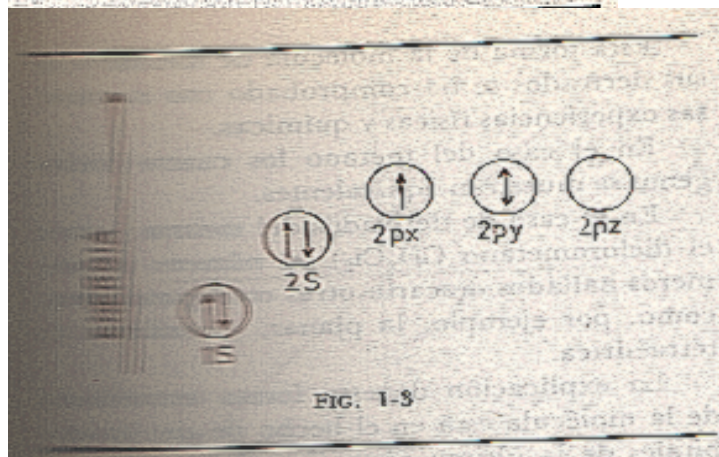
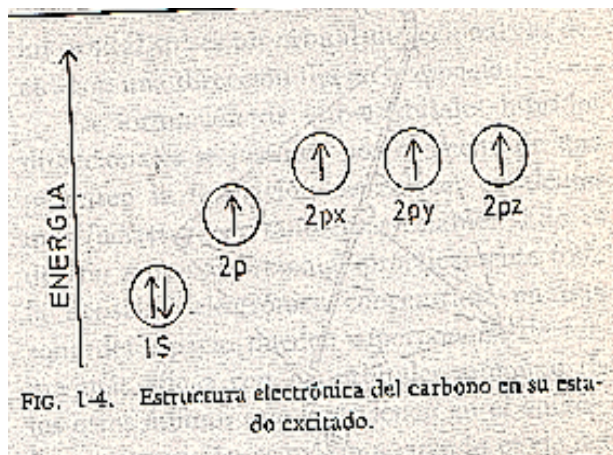
En el caso de los orbitales p, a partir del segundo nivel, en cada uno hay tres que se orientan según los ejes cartesianos en las 3 direcciones del espacio. Por ello se las letras p_x , p_y y p_z . El número que precede a cada orbital representa la capa a que pertenecen.

La distribución de los seis electrones que posee el átomo de carbono, según la estructura mencionada, forma lo que se llama estado electrónico fundamental del carbono.

Según esta estructura será lógico que al combinarse con el hidrógeno formara el compuesto CH_2 , combinando cada orbital p que posee un electrón, con un orbital s del hidrógeno. Este compuesto recibe el nombre de carbeno.

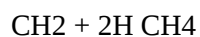
El hecho de que el carbono se una con cuatro átomos de hidrógeno para formar el metano reside su explicación en que cuando se va a combinar su estructura electrónica cambia de un estado fundamental a un estado de excitación. En dicho estado uno de los electrones apareados del orbital 2s ha pasado al orbital 2p que estaba vacío. La estructura electrónica ahora es:

$1s^2 2s^1 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$



Obsérvese que ahora el carbono tiene en su segunda capa 4 orbitales con un electrón cada uno, disponibles para formar enlaces covalentes.

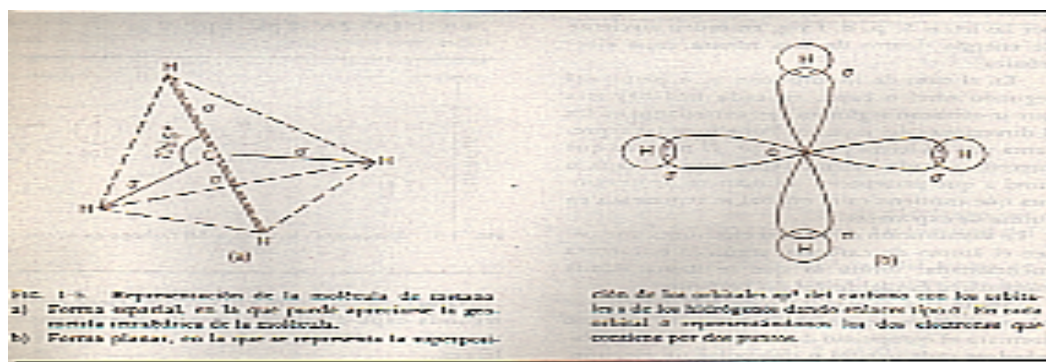
Según la reacción:



Geometría de los enlaces de carbono:

Una vez aclarada la tetravalencia del carbono se observó que la estructura geométrica del metano es la de un tetraedro, en el cual el carbono es el centro y los hidrógenos son los vértices y que los enlaces H-C-H forman un ángulo de 109.5° . la explicación de esta forma tetraédrica de la molécula esta en el hecho de que los orbitales de la última capa electrónica del C sufren un cambio para llevar acabo para formar un enlace. El orbital s tiene forma esférica y que los 3 orbitales p tienen forma de pera con un doble lóbulo y que están orientados perpendicularmente entre si.

Según las teorías de la mecánica cuántica, esta permitido que n orbitales de una capa electrónica puedan combinarse linealmente dando n orbitales híbridos, totalmente equivalentes entre si.



La hibridación de los orbitales no cambia la energía total del sistema si la capa está totalmente vacía de electrones, llena o con un electrón en cada orbital.

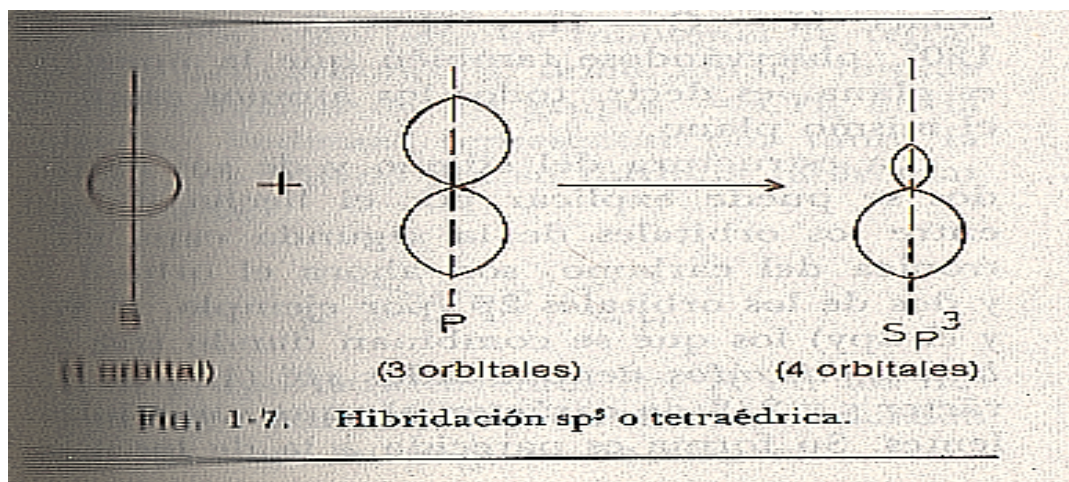
Para formar compuestos como el metano y sus derivados sustituidos el orbital $2s$ y los 3 orbitales $2p$ del C se combinan linealmente dando 4 orbitales híbridos equivalentes que se denominan sp^3 ($\frac{1}{4}$ de carácter s y $\frac{3}{4}$ de carácter p). Tienen una forma parecida a los orbitales p , pero con uno de los lóbulos mucho mayor que el otro, por concentrar toda la intensidad electrónica.

Los cuatro orbitales sp^3 presentan una localización electrónica en una dirección bien determinada y concreta en el espacio (la del lóbulo mayor). Parten del átomo de carbono según la dirección de los vértices de un tetraedro regular, por lo tanto es un orbital direccional, que tiene dirección fija en el espacio.

La formación de estos híbridos se justifica por que permiten la formación de enlaces covalentes mas fuertes y por tanto mas estables, debido a que la intensidad electrónica se concentra en un mismo lugar en el espacio los enlaces pueden superponerse de forma mas eficaz.

Los enlaces formados por estos orbitales sp^3 son llamados orbitales sigma, estos son simétricos respecto al eje que une a los dos átomos.

Tal como se ha citado los ángulos de enlace se modifican según la naturaleza de los átomos o grupos que se unen al carbono. Así el enlace $H-C-H$ presenta un ángulo de enlace de 109.5° y los enlaces $C-C-C$ presentan ángulos de 115.5° . la longitud de un enlace también determina la naturaleza de los átomos que se unen.

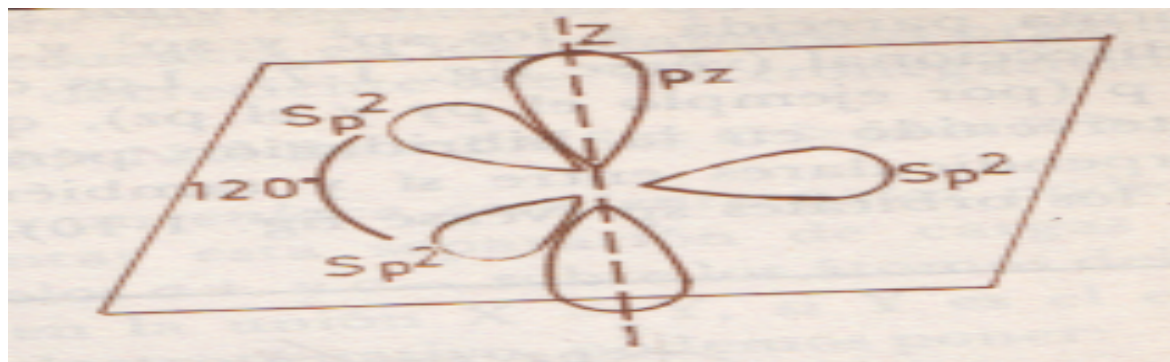


La estructura del etileno y sus derivados se puede explicar por el hecho de que entre sus orbitales de la segunda capa electrónica del carbono, son ahora el orbital $2s$ y dos de los orbitales $2p$ los que se combinan dando como resultado tres orbitales híbridos sp^2 ($\frac{1}{3}$ de carácter s y $\frac{2}{3}$ de carácter p), que son equivalentes. Su forma es parecida a la de los orbitales sp^3 y se orientan según los vértices de un triángulo equilátero(los

lóbulos mayores) formando entre si ángulos de 120° . En cada átomo de C queda un orbital 2p, que no entra en la hibridación y que permanece perpendicular al plano de los orbitales sp^2 . Estos también son direccionales. Al formar la molécula del etileno cada átomo de C se une con dos átomos de H (con orbitales 1s) y el otro átomo de C por medio de los orbitales sp^2 , formando enlaces sigma.

Por otra parte los orbitales pz de cada carbono se superponen lateralmente formando dos orbitales moleculares. El orbital enlazante es ocupado por los dos electrones correspondientes dando lugar a un nuevo enlace que se denomina pi o π , por su perpendicularidad al plano de la molécula.

Este orbital enlazante tiene dos lóbulos como los orbitales p. Pero al unirse a estos lateralmente, la superposición es menos efectiva, por lo que el enlace es más débil y por ende más activo que el enlace sigma. La necesidad de la máxima superposición posible entre los orbitales p hace que la longitud de enlace sea algo mas corta que la que proporcionaría el enlace sigma por si solo. Por tanto puede verse que entre ambos átomos de C existe un doble enlace pi o sigma

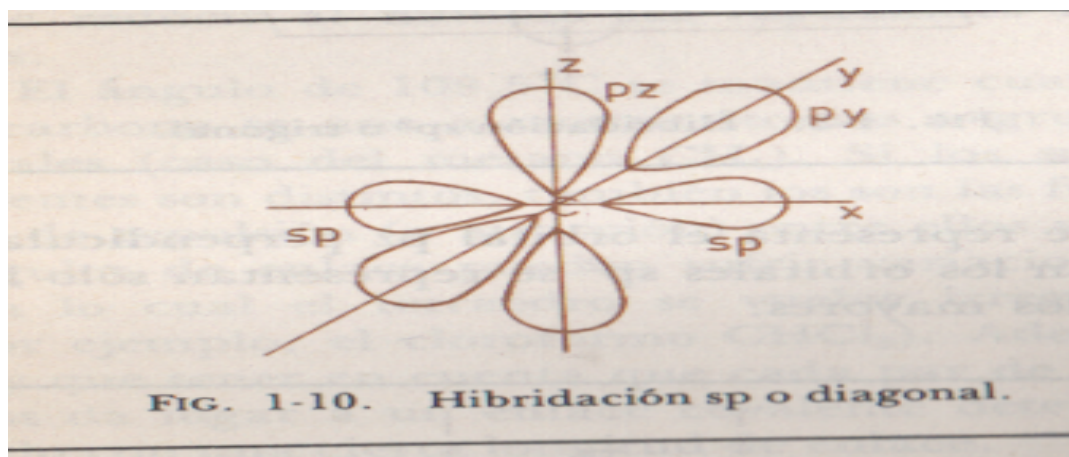


El acetileno, a parte de una aparente bivalencia del carbono, tiene una longitud de enlace de 1.20° , menor que las existente en el átomo de etileno y tiene un enlace de 180° .

En este caso en cada átomo de C un orbital s y uno p se combinan dando dos orbitales híbridos sp ($1/2$ de carácter s y $1/2$ de carácter p), que son equivalentes y colineales, formando un ángulo de 180° entre ellos. El orbital sp tiene una forma parecida a los sp^2 y sp^3 y es por tanto direccional. Los dos orbitales p que no han intervenido en la hibridación permanecen perpendiculares entre si y también respecto a los orbitales sp.

Se presentan los orbitales pz y py se presentan solo los lóbulos mayores. Para formar la molécula de acetileno, cada átomo de C se a uno de H (con 1 orbital 1s) y al otro átomo de carbono, por medio de lo orbitales sp formando enlaces sigma dirigidos a lo largo del eje que une a los átomos de C. A su vez los orbitales p de cada C se recubre lateralmente dos a dos según su dirección en el espacio formando dos pares de orbitales moleculares.

Los dos pares e electrones correspondientes se colocan en los orbitales enlazantes dando a lugar dos enlaces π , perpendiculares entre si y respecto a los enlaces sigma. Entre los enlaces de C existe un enlace triple más corto que el enlace sencillo sigma por necesidades del máximo recubrimiento posible de los orbitales p.



Bibliografía:

Química Orgánica, Duconz Gutiérrez

Diccionario de Química.