

El butirato de metilo y el acetato de propilo, moléculas orgánicas responsables del sabor y la fragancia de las manzanas y las peras, respectivamente, son isómeros estructurales (Sección 1.8).

- 1.1 Cómo se encuentran ordenados los electrones en los átomos
- 1.2 Enlace iónico y covalente
- 1.3 El átomo de carbono y el enlace covalente
- 1.4 Enlaces simples carbono-carbono
- 1.5 Enlaces covalentes polares
- 1.6 Enlaces covalentes múltiples
- 1.7 Valencia
- 1.8 Isomería
- 1.9 Escritura de las fórmulas estructurales
- 1.10 Fórmulas estructurales abreviadas
- 1.11 Carga formal
- 1.12 Resonancia
- 1.13 Formalismo de las flechas
- 1.14 La visión orbital de los enlaces: El enlace sigma
- 1.15 Orbitales híbridos  $sp^3$  del átomo de carbono
- 1.16 El carbono tetraédrico: Los enlaces en el metano
- 1.17 Clasificación de acuerdo con el esqueleto molecular
- 1.18 Clasificación de acuerdo con el grupo funcional



## Enlace e isomería

**¿** Por qué la sacarosa (azúcar de mesa) se derrite a  $185^\circ\text{C}$ , mientras que el cloruro de sodio (sal de mesa) se derrite a una temperatura mucho más alta,  $801^\circ\text{C}$ ? ¿Por qué ambas sustancias se disuelven en agua, mientras que no lo hacen en aceite de oliva? ¿Por qué la molécula de butirato de metilo huele como las manzanas, mientras que la molécula de acetato de propilo, que contiene los mismos átomos, huele a pera? Para contestar preguntas como estas, es necesario entender cómo se enlazan los átomos entre sí. El enlace es la clave de la estructura, las propiedades físicas, y el comportamiento químico de los distintos tipos de materia. Quizás el lector ya haya estudiado el enlace y los conceptos con él relacionados, en cursos de iniciación a la química. Revise brevemente las secciones de este capítulo y, si le son familiares, trate de resolver los problemas. Si puede resolverlos, podrá continuar con otra sección, pero si encuentra dificultad con cualquiera de los problemas aunque sean los finales, estudie con cuidado el capítulo entero porque las ideas desarrolladas aquí, se utilizarán a lo largo de todo el libro.

## 1.1 Cómo se encuentran ordenados los electrones en los átomos

Los **átomos** contienen un **núcleo** pequeño y denso rodeado por **electrones**. El núcleo cargado positivamente contiene la mayor parte de la masa del átomo. El núcleo consiste en **protones**, que tienen carga positiva, y en **neutrones**, que son neutros. (La única excepción es el hidrógeno, cuyo núcleo consta sólo de un protón). En un átomo neutro la carga positiva del núcleo se equilibra por la carga negativa de los electrones que lo rodean. El **número atómico** de un elemento es igual al número de protones en el núcleo (y al número de electrones alrededor del núcleo si es un átomo neutro). El **peso atómico** es aproximadamente igual a la suma del número de protones y neutrones en el núcleo; los electrones no se consideran porque, comparativamente, son muy ligeros. La tabla periódica que se encuentra al final del libro muestra todos los elementos con sus números atómicos y sus pesos atómicos.

El interés principal reside en los electrones del átomo ya que su número y disposición proporcionan la clave de cómo un átomo en particular reacciona con otros para formar moléculas. De igual manera, se va a considerar sólo el ordenamiento de electrones de los elementos más ligeros porque son los más importantes en las moléculas orgánicas.

Los electrones se concentran en ciertas regiones espaciales alrededor del núcleo que reciben el nombre de **orbitales**. Cada orbital contiene un máximo de dos electrones. Los orbitales, que se diferencian en la forma, se designan por las letras *s*, *p* y *d*. Los orbitales están agrupados en **capas** designadas por los números 1, 2, 3, etc. Cada capa contiene distintos tipos y diferente número de orbitales, que coinciden con el número de capa. Por ejemplo, la capa 1, contiene sólo un tipo de orbital, designado como orbital *1s*. La capa 2 contiene dos tipos de orbitales, *2s* y *2p*, y la capa 3 contiene tres tipos, *3s*, *3p* y *3d*. Dentro de cada capa, el número de orbitales *s*, *p*, y *d* es 1, 3 y 5, respectivamente (Tabla 1.1). Estas reglas permiten calcular cuántos electrones contiene cada nivel cuando está lleno (última columna en la Tabla 1.1). La Tabla 1.2 muestra cómo se disponen los electrones de los 18 primeros elementos.

La primera capa está completa para el helio (He) y en todos los elementos que le siguen, la segunda capa está llena para el neón (Ne) y en todos los elementos que le siguen. Las capas completas no juegan un papel importante en el enlace químico. Son los electrones externos, o **electrones de valencia**, los que intervienen principalmente en el enlace químico, por lo cual se centrará la atención sobre ellos.

La Tabla 1.3 muestra los electrones de valencia, que corresponden a la capa exterior, para los 18 primeros elementos. El símbolo representa la parte fundamental, **kernel**, del elemento (el núcleo más las capas completas de electrones), y los puntos representan los electrones de valencia. Los elementos se ordenan en grupos, de acuerdo con la tabla periódica, y (excepto el helio) los números de grupo corresponden al número de electrones de valencia.

Una vez que se tiene esta información de la estructura atómica, se puede abordar el problema de cómo se combinan los elementos entre sí para formar enlaces químicos.

Un **átomo** consiste en un pequeño **núcleo** denso que contiene **protones** cargados positivamente y **neutrones** neutros rodeado de **electrones** cargados negativamente. El **número atómico** de un elemento es igual al número de protones en su núcleo; su **peso atómico** es la suma del número de protones y neutrones del núcleo.

Los electrones se localizan en **orbitales**. Los orbitales se agrupan en **capas**. Un orbital puede albergar un máximo de dos electrones.

Los **electrones de valencia** se localizan en la capa exterior. El **Kernel** del átomo contiene el núcleo y los electrones de capas internas.

**TABLA 1.1 NÚMERO DE ORBITALES Y ELECTRONES DE LAS TRES PRIMERAS CAPAS**

Número de capa	Número de orbitales de cada tipo			Número total de electrones cuando la capa está completa
	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	
1	1	0	0	2
2	1	3	0	8
3	1	3	5	18

**TABLA 1.2 DISTRIBUCIÓN DE ELECTRONES PARA LOS 18 PRIMEROS ELEMENTOS**

Número atómico	Elemento	Número de electrones en cada orbital				
		1s	2s	2p	3s	3p
1	H	1				
2	He	2				
3	Li	2	1			
4	Be	2	2			
5	B	2	2	1		
6	C	2	2	2		
7	N	2	2	3		
8	O	2	2	4		
9	F	2	2	5		
10	Ne	2	2	6		
11	Na	2	2	6	1	
12	Mg	2	2	6	2	
13	Al	2	2	6	2	1
14	Si	2	2	6	2	2
15	P	2	2	6	2	3
16	S	2	2	6	2	4
17	Cl	2	2	6	2	5
18	Ar	2	2	6	2	6

**TABLA 1.3 ELECTRONES DE VALENCIA DE LOS 18 PRIMEROS ELEMENTOS**

Grupo	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
	H ·							He :
	Li ·	· Be ·	· B ·	· C ·	· N ·	· O ·	· F ·	· Ne ·
	Na ·	· Mg ·	· Al ·	· Si ·	· P ·	· S ·	· Cl ·	· Ar ·

## 1.2 Enlace iónico y covalente

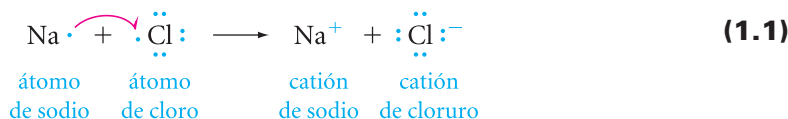
Un **gas inerte** tiene una configuración estable de electrones.

En 1916, Gilbert Newton Lewis, profesor en la Universidad de California en Berkeley, propuso una teoría que todavía es de gran ayuda. Lewis estableció que el helio, un **gas inerte**, tenía sólo dos electrones en torno a su núcleo y que el siguiente gas inerte, el neón, tenía diez electrones (2 + 8; véase Tabla 1.2). Llegó a la conclusión de que los átomos de estos gases tenían disposiciones muy estables de electrones *porque estos elementos no se combinan con otros átomos*. Posteriormente, sugirió que otros átomos reaccionaban de una determinada forma para alcanzar estas ordenaciones estables. Esta estabilidad

podría alcanzarse de dos maneras: por transferencia completa de electrones de un átomo a otro, o por compartición de electrones entre átomos.

### 1.2.a Compuestos iónicos

Los **enlaces iónicos** se forman por la transferencia de uno o más electrones de valencia de un átomo a otro. Como los electrones están cargados negativamente, el átomo que cede los electrones se queda cargado positivamente, convirtiéndose en un **catión**. El átomo que recibe electrones queda cargado negativamente, convirtiéndose en un **anión**. La reacción entre átomos de sodio y átomos de cloro para formar el cloruro de sodio (sal común o de mesa) es una reacción típica de transferencia de electrones\*.

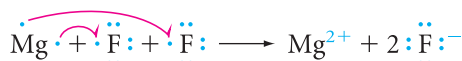


El átomo de sodio tiene sólo un electrón de valencia (que se encuentra en la tercera capa; véase Tabla 1.2), al ceder este electrón alcanza la configuración electrónica del neón, al mismo tiempo que adquiere carga positiva, transformándose en el catión sodio. El átomo de cloro tiene siete electrones de valencia. Al aceptar un electrón adicional, alcanza la configuración electrónica del argón y se carga negativamente, convirtiéndose en el anión cloruro. Los átomos, como el sodio, que tienden a ceder electrones, se dice que son **electropositivos**. Estos átomos, a menudo suelen ser metales. Los átomos, como el cloro, que tienden a aceptar electrones, se dice que son **electronegativos**. Con frecuencia tales átomos suelen ser no metales.

#### EJEMPLO 1.1

Escriba una ecuación para la reacción entre el átomo de magnesio (Mg) y el átomo de flúor (F).

#### SOLUCIÓN



El magnesio tiene dos electrones de valencia. Puesto que cada átomo de flúor puede aceptar sólo un electrón (del magnesio) para completar su capa de valencia, se necesitan dos átomos de flúor para reaccionar con un átomo de magnesio.

**PROBLEMA 1.1** Escriba una ecuación para la reacción entre el átomo de litio (Li) y el átomo de bromo (Br).

El producto de la Ecuación 1.1 es el cloruro sódico, un compuesto iónico compuesto de igual número de iones cloruro y sodio. En general, los compuestos iónicos se forman cuando interactúan átomos fuertemente electropositivos y átomos fuertemente electronegativos. Los iones de una sustancia iónica se mantienen unidos en el cristal por fuerzas atractivas entre cargas opuestas, como se muestra en la Figura 1.1 para el cristal de cloruro sódico.

En cierto modo, el enlace iónico no es realmente un enlace como tal. Al tener cargas opuestas, los iones se atraen unos a otros de igual forma que los polos opuestos de un imán. En el cristal, los iones están acomodados con un orden definido, pero no se puede decir que un ion esté unido a otro en particular. Por supuesto, cuando la sustancia se disuelve, los iones se separan y son capaces de moverse en la disolución con relativa libertad.

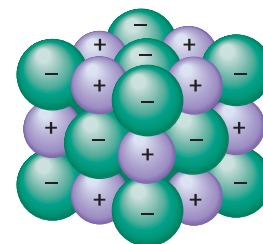
\*La flecha curva en la Ecuación 1.1 muestra el movimiento de un electrón desde la capa de valencia del átomo de sodio a la capa de valencia del átomo de cloro. El empleo de flechas curvas para mostrar el movimiento de los electrones se explica con mayor detalle en la Sección 1.13.

Los compuestos iónicos se encuentran constituidos por cationes cargados positivamente y aniones cargados negativamente.

Los átomos **electropositivos** ceden electrones y forman cationes. Los átomos **electronegativos** aceptan electrones y forman aniones.

#### FIGURA 1.1

El cloruro de sodio, NaCl, es un cristal iónico. Las esferas púrpuras representan los iones sodio,  $\text{Na}^+$ , y las esferas verdes representan los iones cloruro,  $\text{Cl}^-$ . Cada ion se rodea de seis iones de carga opuesta, salvo los iones que están en la superficie del cristal.



**EJEMPLO 1.2**

¿Qué carga tendrá el ion berilio?

**SOLUCIÓN** Como se ha visto en la Tabla 1.3, el berilio (Be) tiene dos electrones de valencia. Para alcanzar la disposición electrónica de capa llena del helio, debe perder ambos electrones de valencia. Así, el catión berilio tendrá dos cargas positivas y se representa por  $\text{Be}^{2+}$ .

**PROBLEMA 1.2** Use la Tabla 1.3, para determinar la carga que tendrá cada ion cuando cada uno de los elementos siguientes reaccione para formar un compuesto iónico: Al, Li, S, O.

Por lo general, los elementos más electropositivos de una fila horizontal de la tabla periódica, son aquellos que se encuentran hacia la izquierda, y los elementos más electronegativos son aquellos que se encuentran hacia la derecha. En una columna vertical, los elementos más electropositivos son los que están más abajo, y los más electronegativos aparecen en la parte de arriba

**EJEMPLO 1.3**

¿Que átomo es el más electropositivo?

- a. Litio o berilio.      b. Litio o sodio.

**SOLUCIÓN**

- a. El núcleo de litio presenta menor carga positiva (+3) para atraer a los electrones que el núcleo de berilio (+4). Por lo tanto, se requiere menos energía para arrancar un electrón del litio que la requerida para arrancar uno del berilio. Por esto, el litio pierde un electrón más fácilmente que el berilio, el litio es el átomo más electropositivo.
- b. El electrón de valencia en el átomo de sodio se encuentra protegido del núcleo positivo por dos capas interiores de electrones, mientras que el electrón de valencia del litio está protegido sólo por una capa interior. Por lo tanto, se requiere menos energía para arrancar un electrón del sodio, por lo que es el elemento más electropositivo.

**PROBLEMA 1.3** Utilice la Tabla 1.3 para determinar qué elemento es más electropositivo: sodio o aluminio, boro o carbono, boro o aluminio.

**PROBLEMA 1.4** Utilice la Tabla 1.3 para determinar qué elemento es más electronegativo: oxígeno o flúor, oxígeno o nitrógeno, flúor o cloro.

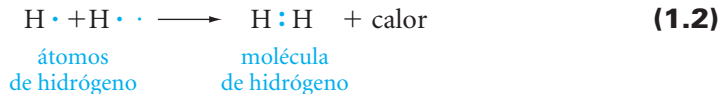
**PROBLEMA 1.5** De acuerdo con la posición del carbono en la Tabla 1.3, ¿cabe esperar que sea electropositivo o electronegativo?

**1.2.b Enlace covalente**

Los elementos que no son, ni fuertemente electronegativos, ni fuertemente electropositivos, o presentan electronegatividades similares, tienden a formar enlaces compartiendo pares de electrones en lugar de transferirlos completamente. Un **enlace covalente** implica la compartición entre átomos de uno o más pares de electrones. Dos (o más) átomos unidos por enlace covalente constituyen una **molécula**. Cuando los dos átomos son

El **enlace covalente** se forma cuando dos átomos comparten uno o más pares de electrones. Una **molécula** consiste en dos o más átomos unidos por enlaces covalentes.

idénticos o tienen iguales electronegatividades, los pares de electrones se comparten por igual. La molécula de hidrógeno es un ejemplo.



Se puede considerar que cada átomo de hidrógeno ha completado su primera capa de electrones por el proceso de compartición. Es decir, se considera como si cada átomo “posee” todos los electrones que comparte con otro átomo, como se muestra mediante círculos en estas estructuras.



### EJEMPLO 1.4

Escriba una ecuación similar a la Ecuación 1.2 para la formación de una molécula de cloro a partir de dos átomos de cloro.

#### SOLUCIÓN



Los dos átomos de cloro comparten un par de electrones. De este modo, cada cloro completa su capa de valencia con ocho electrones (tres pares no compartidos y un par compartido).

**PROBLEMA 1.6** Escriba una ecuación similar a la Ecuación 1.2 para la formación de una molécula de flúor a partir de dos átomos de flúor.

Cuando se combinan dos átomos de hidrógeno para formar una molécula, se libera calor. Al contrario, se debe suministrar esta misma cantidad de calor (energía) a una molécula de hidrógeno para romperla y separarla en sus átomos. Para romper un mol de moléculas de hidrógeno (2 gramos) en sus átomos constitutivos se requiere 104 kcal (o 435 kJ\*) de calor, una gran cantidad de energía. Esta energía recibe el nombre de **energía de enlace**, o **EE**, y es diferente para enlaces entre átomos distintos. (Véase Tabla A en el apéndice).

El enlace H—H es un enlace muy fuerte. La razón principal es que el par de electrones compartido es atraído por *ambos* núcleos de hidrógeno, mientras que en un átomo de hidrógeno, el electrón de valencia es atraído sólo por un núcleo. Hay otras fuerzas en la molécula de hidrógeno que tienden a contrarrestar la atracción entre el par de electrones y los núcleos. Éstas son las fuerzas de repulsión entre los dos núcleos que tienen la misma carga y la repulsión entre los dos electrones también con igual carga entre sí. De esta manera se alcanza un equilibrio entre las fuerzas atractivas y las fuerzas repulsivas. Los átomos de hidrógeno no se separan ni se juntan más. Permanecen unidos o enlazados, vibrando sobre una distancia de equilibrio, que se denomina **longitud de enlace**. Para una molécula de hidrógeno, la longitud de enlace (es decir, la distancia media entre los dos núcleos de hidrógeno) es 0,74 Å\*\*. la longitud de un enlace covalente depende de los átomos que se unen y del número de pares de electrones compartidos por los átomos. En la Tabla B del apéndice, se muestran las longitudes de enlace para algunos enlaces covalentes típicos.

**La energía de enlace (EE)** es la energía necesaria para romper un mol de enlaces covalentes. La cantidad de energía depende del tipo de enlace roto.

**La longitud de enlace** es la distancia media entre dos átomos unidos covalentemente.

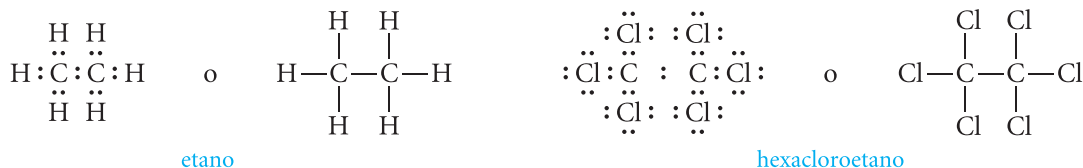
\*A pesar de que la mayoría de los químicos orgánicos utilizan la kilocaloría como unidad de calor energético, la unidad internacional usada comúnmente es el Kilojulio; 1 kcal = 4,184 kJ. En este texto, se usa la kilocaloría. Si su profesor prefiere usar el kJ, hay que multiplicar la kcal  $\times$  4,184 (o  $\times$  4 para una primera estimación) para pasar a kJ.

\*\*1 Å, o unidad de angstrom, es igual a  $10^{-8}$  cm, por lo tanto, la longitud del enlace H—H es igual a  $0,74 \times 10^{-8}$  cm. Aunque el angstrom se usa comúnmente en química orgánica, existe otra unidad utilizada con frecuencia para las longitudes de enlace, es el picómetro (pm; 1 Å = 100 pm). Para convertir la longitud del enlace H—H de Å a pm, hay que multiplicar  $0,74 \times 100$ . La longitud de enlace H—H es 74 pm. En este texto, se utilizará el angstrom como unidad de longitudes de enlace.



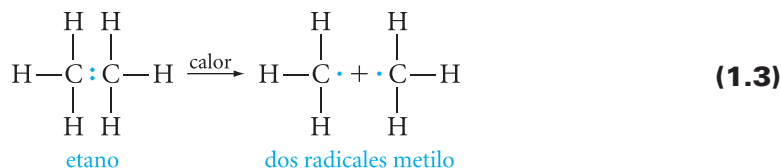
## 1.4 Enlaces simples carbono-carbono

La propiedad, única para los átomos de carbono —es decir, la propiedad que hace posible que existan millones de compuestos orgánicos— es su capacidad de compartir electrones no sólo con elementos diferentes, sino también con otros átomos de carbono. Por ejemplo, dos átomos de carbono pueden unirse el uno al otro, y cada uno de ellos puede estar unido a otros átomos. En el etano y el hexacloroetano, cada carbono está unido a otro carbono y a tres átomos de hidrógeno o a tres átomos de cloro. A pesar de que estos compuestos tengan dos átomos de carbono en vez de uno, tienen propiedades químicas similares a las del metano y el tetraclorometano, respectivamente.



El enlace carbono-carbono del etano, al igual que el enlace hidrógeno-hidrógeno de la molécula de hidrógeno, es un enlace covalente puro, con los electrones compartidos *por igual* entre los dos átomos de carbono idénticos. Al igual que con la molécula de hidrógeno, se necesita calor para romper el enlace carbono-carbono del etano para obtener dos fragmentos  $\text{CH}_3$  (llamados radicales metilo). Un **radical** es un fragmento molecular con un número impar de electrones no compartidos.

Un **radical** es un fragmento molecular con un número impar de electrones no compartidos.



Sin embargo, se requiere menos calor para romper el enlace carbono-carbono del etano que para romper el enlace hidrógeno-hidrógeno en una molécula de hidrógeno. La cantidad real es 88 kcal (o 368 kJ) por mol de etano. El enlace carbono-carbono del etano es más largo (1,54 Å) que el enlace hidrógeno-hidrógeno (0,74 Å) y por lo tanto más débil. La ruptura del enlace carbono-carbono por calor, representada en la Ecuación 1.3, es el primer paso del craqueo del petróleo, un importante proceso en la producción de gasolina (véase *Unas palabras acerca de...* El petróleo, la gasolina y el índice de octano en pp. 108-109).

### EJEMPLO 1.6

¿Cómo será la longitud de un enlace C—H (en el metano o en el etano)?

**SOLUCIÓN** Debe tener una medida intermedia entre la longitud del enlace H—H en la molécula de hidrógeno (0,74 Å) y la longitud del enlace C—C del etano (1,54 Å). El valor real es de aproximadamente 1,09 Å, cercano al valor promedio de las longitudes de los enlaces H—H y C—C.

**PROBLEMA 1.8** La longitud del enlace Cl—Cl es 1,98 Å. ¿Qué enlace será más largo, el enlace C—C en el etano o el enlace C—Cl en el clorometano?



La **concatenación** es la capacidad de un elemento para formar cadenas como resultado de los enlaces covalentes de sus propios átomos.

No existe ningún límite con respecto al número de átomos de carbono que pueden enlazarse, y algunas moléculas contienen más de 100 enlaces carbono-carbono. A la capacidad de un elemento para formar cadenas como consecuencia de los enlaces entre los mismos átomos, se le denomina **concatenación**.

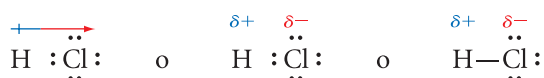
**PROBLEMA 1.9** Utilice la estructura del etano como guía, y dibuje una estructura para el propano,  $C_3H_8$ .

## 1.5 Enlaces covalentes polares

Como se ha estudiado, los enlaces covalentes no sólo se forman entre átomos idénticos ( $H-H$ ,  $C-C$ ) sino también entre átomos diferentes ( $C-H$ ,  $C-Cl$ ), los cuales no presentan grandes diferencias de electronegatividad. Sin embargo, si los átomos son diferentes, el par de electrones no puede ser compartido igualmente entre ellos. Este tipo de enlace se suele llamar **enlace covalente polar** porque los átomos unidos adquieren una carga parcial negativa y una carga parcial positiva.

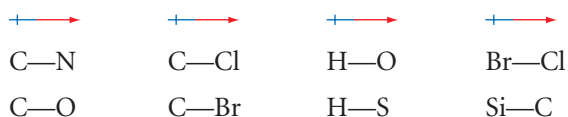
Un **enlace de covalente polar** es un enlace covalente en el cual el par de electrones no es compartido igualmente por los dos átomos.

La molécula de cloruro de hidrógeno constituye un ejemplo de enlace covalente polar. Los átomos de cloro son más electronegativos que los átomos de hidrógeno, pero aún así, el enlace que forman es más covalente que iónico. Sin embargo, el par de electrones compartido está más atraído por el cloro, lo cual lo hace ligeramente negativo, que por el hidrógeno. Esta polarización del enlace se indica por una flecha cuya cabeza es negativa y cuyo final está marcado por un signo positivo. Las cargas parciales, representadas por  $\delta+$  o  $\delta-$  (se lee “delta más” o “delta menos”), pueden representarse:



El par de electrones de enlace, que se comparte *desigualmente*, se desplaza hacia el cloro.

Por lo general se puede confiar en la tabla periódica para determinar qué extremo de un enlace covalente polar es el más negativo y cuál el más positivo. Según se avanza de izquierda a derecha a través de la tabla dentro de un mismo período, los elementos se hacen *más* electronegativos, debido al aumento del número atómico o a la carga del núcleo. Al aumentar la carga nuclear, los electrones de valencia son atraídos con más fuerza. Según se avanza de arriba hacia abajo dentro de un grupo en la tabla (descenso en una columna), los elementos son *menos* electronegativos porque los electrones de valencia están protegidos del núcleo por un número creciente de electrones de las capas internas. A partir de estas generalizaciones, se puede afirmar que el átomo situado a la derecha en cada una de los siguientes enlaces será negativo con respecto al átomo de la izquierda:



El enlace carbono-hidrógeno, que es tan común en los compuestos orgánicos, requiere un trato especial. El carbono y el hidrógeno tienen electronegatividades casi idénticas, por lo que el enlace  $C-H$  es casi covalente puro. En la lista de la Tabla 1.4, se muestran las electronegatividades de algunos elementos comunes.

**TABLA 1.4 ELECTRONEGATIVIDADES DE ALGUNOS ELEMENTOS COMUNES**

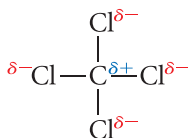
Grupo

I	II	III	IV	V	VI	VII
H 2,2						
Li 1,0	Be 1,6	B 2,0	C 2,5	N 3,0	O 3,4	F 4,0
Na 0,9	Mg 1,3	Al 1,6	Si 1,9	P 2,2	S 2,6	Cl 3,2
K 0,8	Ca 1,0					Br 3,0
						I 2,7

	< 1,0		1,5–1,9		2,5–2,9
	1,0–1,4		2,0–2,4		3,0–4,0

**EJEMPLO 1.7**

Indique la polarización de los enlaces en la estructura del tetraclorometano.

**SOLUCIÓN**


El cloro es más electronegativo que el carbono. Los electrones en cada enlace C—Cl por lo tanto, se desplazan hacia el cloro.

**PROBLEMA 1.10** Prediga la polaridad del enlace P—Cl y del enlace S—O.

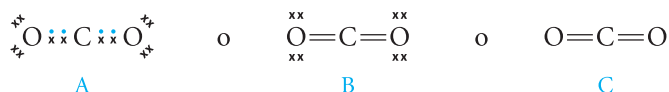
**PROBLEMA 1.11** Dibuje la estructura del refrigerante diclorodifluorometano,  $\text{CCl}_2\text{F}_2$  (CFC-12), e indique la polaridad de sus enlaces. (El átomo C es el átomo central).

**PROBLEMA 1.12** Dibuje la fórmula del metanol,  $\text{CH}_3\text{OH}$ , y (donde considere apropiado) indique la polaridad del enlace con una flecha,  $\rightarrow$ . (El átomo de C se une a tres átomos de H y al átomo de O).

## 1.6 Enlaces covalentes múltiples

Para completar sus capas de valencia, los átomos a veces pueden compartir más de un par de electrones. El dióxido de carbono,  $\text{CO}_2$ , es un ejemplo. El átomo de carbono tiene cuatro electrones de valencia, y cada oxígeno tiene seis electrones de valencia.

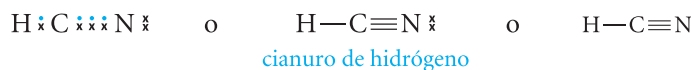
Una estructura que permite que cada átomo complete su capa de valencia con ocho electrones es:



En la estructura A, los puntos representan los electrones del carbono, y las x son los electrones de los oxígenos. La estructura B muestra los enlaces y los electrones no compartidos del oxígeno, y la estructura C muestra sólo los enlaces covalentes. Se comparten dos pares de electrones entre el carbono y el oxígeno. Por consiguiente, este enlace se llama **doble enlace**. Cada átomo de oxígeno tiene también dos pares de electrones no enlazantes, o **pares de electrones no compartidos**. Los círculos en las siguientes estructuras muestran cómo, en el dióxido de carbono, cada uno de los átomos tiene completa su capa de valencia con ocho electrones:



El cianuro de hidrógeno, HCN, es un ejemplo sencillo de un compuesto con **triple enlace**, un enlace en el que se comparten tres pares de electrones.



En un **doble enlace** se comparten dos pares de electrones entre dos átomos.

Los **electrones no enlazantes, o pares de electrones no compartidos**, pertenecen a un solo átomo.

En un **triple enlace** se comparten tres pares de electrones entre dos átomos.

**PROBLEMA 1.13** Muestre con círculos cómo cada átomo, en el cianuro de hidrógeno, completa su capa de valencia.

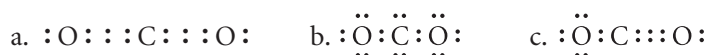
### EJEMPLO 1.8

Determine cuál es el error, si es que existe, en la siguiente distribución electrónica para el dióxido de carbono:



**SOLUCIÓN** La fórmula contiene el número total correcto de electrones de valencia (16), y cada oxígeno está rodeado por 8 electrones de valencia, lo que también es correcto. El error se encuentra en el átomo de carbono que tiene 10 electrones de valencia, 2 más de los permitidos.

**PROBLEMA 1.14** Determine cuál es el error en cada una de las disposiciones electrónicas siguientes para el dióxido de carbono:

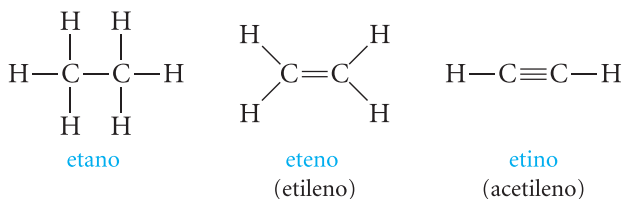


**PROBLEMA 1.15** El metanal (formaldehído) tiene la fórmula  $\text{H}_2\text{CO}$ . Dibuje una estructura que muestre cómo se colocan los electrones de valencia.

**PROBLEMA 1.16** Dibuje una estructura de Lewis para el monóxido de carbono, CO.

Los átomos de carbono pueden unirse entre sí mediante dobles enlaces o triples enlaces, así como por enlaces sencillos. Por lo tanto, existen tres **hidrocarburos** (compuestos formados de carbono e hidrógeno exclusivamente) que tienen dos átomos de carbono por molécula: etano, eteno y etino.

Los **hidrocarburos** son compuestos que contienen únicamente átomos de hidrógeno y de carbono.

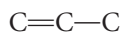


La diferencia entre ellos consiste en que el enlace carbono-carbono es sencillo, doble, o triple, respectivamente. También difieren en el número de hidrógenos. Como se podrá ver más adelante, estos compuestos tienen reactividades químicas diferentes debido a los diferentes tipos de enlaces entre los átomos de carbono.

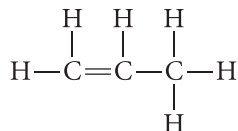
### EJEMPLO 1.9

Dibuje la fórmula estructural para el  $\text{C}_3\text{H}_6$  que contenga un doble enlace carbono-carbono.

**SOLUCIÓN** Primero, dibuje los tres carbonos con un enlace doble.



Después agregue los hidrógenos de tal modo que cada carbono tenga ocho electrones alrededor (o bien que cada carbono tenga cuatro enlaces).



**PROBLEMA 1.17** Dibuje tres estructuras diferentes que tengan la fórmula  $\text{C}_4\text{H}_8$  y un doble enlace carbono-carbono.

## 1.7 Valencia

La **valencia** de un elemento es simplemente el número de enlaces que puede formar un átomo de dicho elemento. Este número es por lo general igual al *número de electrones que necesita para completar su capa de valencia*. La Tabla 1.5 muestra las valencias comunes de varios elementos. Observe la diferencia entre el número de electrones de valencia y la valencia. El oxígeno, por ejemplo, tiene seis electrones de valencia, pero una valencia de 2. La *suma* de los dos números es igual al número de electrones que completan la capa de valencia.

Las valencias de la Tabla 1.5 se emplean tanto para enlaces sencillos, dobles o triples. Por ejemplo, el carbono tiene cuatro enlaces en cada una de las estructuras que hemos escrito hasta ahora: metano, tetraclorometano, etano, eteno, etino, dióxido de carbono, etc. Es de gran utilidad recordar estas valencias comunes, porque ayudarán a escribir las estructuras correctas.

La **valencia** de un elemento es el número de enlaces que puede formar un átomo de dicho elemento.

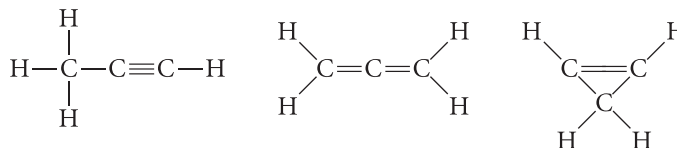
**TABLA 1.5 VALENCIAS COMUNES DE ALGUNOS ELEMENTOS**

Elemento	H·	·C·	·N·	·O·	·F·	·Cl·
Valencia	1	4	3	2	1	1

**EJEMPLO 1.10**

Dibuje una estructura para el  $C_3H_4$ , utilizando líneas para describir los enlaces y cumpliendo con la valencia de 1 para cada hidrógeno y 4 para cada carbono.

**SOLUCIÓN** Hay tres posibilidades:



Los compuestos que corresponden a cada una de estas tres disposiciones diferentes de átomos son conocidos.

**PROBLEMA 1.18** Utilice líneas para los enlaces y las valencias mostradas en la Tabla 1.5 y escriba una estructura para cada una de las siguientes fórmulas:

a.  $CH_5N$                       b.  $CH_4O$

**PROBLEMA 1.19** ¿La fórmula  $C_2H_5$  representa una molécula estable?

En el Ejemplo 1.10, se ha visto que tres átomos de carbono y cuatro átomos de hidrógeno pueden unirse de tres modos diferentes, cada uno de los cuales satisface las valencias de ambas clases de átomos. A continuación se va a analizar con más detalle este fenómeno.

**1.8 Isomería**

La **fórmula molecular** de una sustancia indica el número de átomos diferentes presentes; la **fórmula estructural** indica cómo se disponen estos átomos.

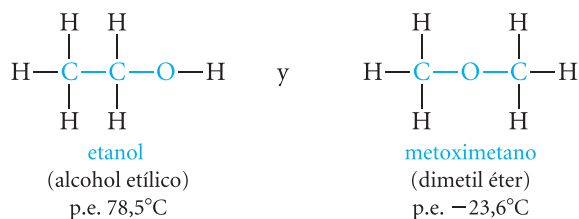
La **fórmula molecular** de una sustancia indica el número de átomos diferentes que están presentes, pero es la fórmula estructural la que indica cómo se disponen estos átomos. Por ejemplo,  $H_2O$  es la fórmula molecular del agua. Esto significa que cada molécula de agua contiene dos átomos de hidrógeno y un átomo de oxígeno. Pero la fórmula estructural  $H-O-H$  proporciona más información. Muestra que los hidrógenos están unidos al oxígeno (y no uno con otro).

Los **isómeros** son moléculas con el mismo número y tipo de átomos, pero con diferentes disposiciones de los átomos. Los **isómeros estructurales** (o **constitucionales**) tienen la misma fórmula molecular, pero diferentes fórmulas estructurales.

En algunas ocasiones es posible acomodar los mismos átomos en más de una forma satisfaciendo también sus valencias. Las moléculas que tienen el mismo tipo y número de átomos pero ordenamientos diferentes reciben el nombre de **isómeros**, término que viene del griego (*isos*, igual, y *meros*, parte). Los **isómeros estructurales** (o **constitucionales**) son compuestos que tienen la misma fórmula molecular, pero diferentes fórmulas estructurales. Se van a analizar un par de isómeros en particular.

Se conocen dos sustancias químicas muy diferentes, cada una con la fórmula molecular  $C_2H_6O$ . Una de estas sustancias es un líquido incoloro que hierve a  $78,5^\circ C$ , mientras que la otra es un gas incoloro a temperaturas ordinarias (p.e.  $-23,6^\circ C$ ). La única explicación posible es que los átomos de las moléculas de cada sustancia estén dispuestos de manera diferente y que estas disposiciones son, de algún modo, responsables del hecho de que una sustancia sea un líquido y la otra, un gas.

Para la fórmula molecular  $C_2H_6O$ , son posibles dos (y sólo dos) fórmulas estructurales que cumplan con la valencia de 4 exigida al carbono, de 2 exigida al oxígeno y de 1 exigida al hidrógeno. Dichas fórmulas son:



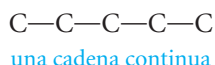
En una de las fórmulas, los dos carbonos están unidos mediante un enlace covalente sencillo; en la otra fórmula, cada carbono estaba unido al oxígeno. Cuando se completan la valencias por adición de hidrógenos, cada ordenamiento requiere seis hidrógenos. Estas asignaciones estructurales están confirmadas con muchas otras pruebas experimentales. Más adelante (capítulos 7 y 8) se explicará por qué estas disposiciones de átomos producen sustancias que son tan diferentes unas de otras.

El etanol y el metoximetano son isómeros estructurales. Tienen la misma fórmula molecular, pero fórmulas estructurales diferentes. El etanol y el metoximetano se diferencian en propiedades físicas y químicas como consecuencia de la diferencia en su estructura molecular. En general, los isómeros estructurales son compuestos diferentes. Difieren en propiedades físicas y químicas como consecuencia de que sus estructuras moleculares son diferentes.

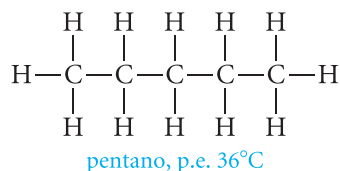
**PROBLEMA 1.20** Dibuje las fórmulas estructurales para los tres isómeros posibles del  $C_3H_8O$ .

## 1.9 Escritura de las fórmulas estructurales

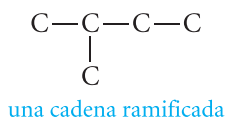
A lo largo de todo el curso se van a utilizar fórmulas estructurales, por lo que se van a proporcionar algunos consejos que pueden ser de gran ayuda. Se va a analizar otro caso de isomería. Suponga que se quieren escribir todas las fórmulas estructurales posibles que correspondan a la fórmula molecular  $C_5H_{12}$ . Se empieza escribiendo los cinco carbonos en una **cadena continua**.



Esta cadena consume una valencia para cada uno de los carbonos finales y dos valencias para los carbonos internos. Cada carbono terminal, por lo tanto, tiene tres valencias libres para enlazar hidrógenos. Cada carbono interno tiene sólo dos valencias para unirse con hidrógenos. Como consecuencia, la fórmula estructural en este caso se escribe:



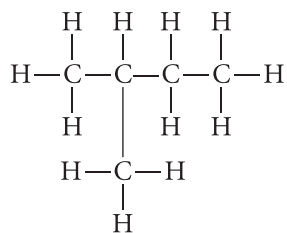
Para encontrar las fórmulas estructurales de los otros isómeros, hay que considerar las **ramificaciones de cadena**. Por ejemplo, podemos reducir la cadena más larga a sólo cuatro carbonos y unir el quinto carbono a uno de los carbonos intermedios, como en la fórmula estructural siguiente:



En una **cadena continua**, los átomos se unen uno tras otro.

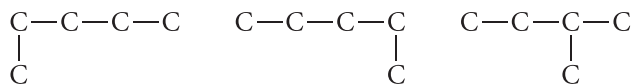
En una **cadena ramificada**, algunos átomos forman ramificaciones que salen de la cadena continua más larga.

Si se agregan los enlaces restantes para que cada carbono tenga una valencia de 4, se puede observar que tres de los carbonos tienen unidos tres hidrógenos, pero los otros carbonos tienen sólo uno o dos hidrógenos. La fórmula molecular, sin embargo, sigue siendo  $C_5H_{12}$ .



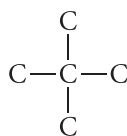
2-metilbutano, p.e. 28°C  
(isopentano)

Suponga que se mantiene la cadena de cuatro carbonos y se intenta unir el quinto carbono en otra parte. Considere las cadenas siguientes:

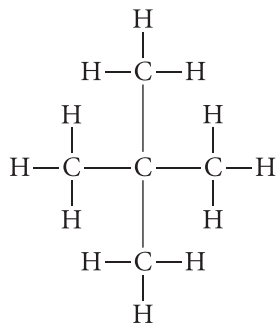


¿Hay alguna estructura nueva? ¡No! Las dos primeras estructuras tienen cadenas de cinco carbonos, exactamente igual que en la fórmula para el pentano, y la tercera estructura es idéntica a la de cadena ramificada que se acaba de mostrar para el 2-metilbutano, una cadena de cuatro carbonos con un carbono ramificado unido al segundo carbono de la cadena (comenzando la numeración ahora por la derecha en vez de por la izquierda). Observe que para escribir cada pentano se puede dibujar una línea a través de los cinco átomos de carbono sin levantar el lápiz del papel. Para las estructuras del 2-metilbutano, la línea continua utilizada pasa únicamente a través de cuatro átomos de carbono\*.

Pero hay un tercer isómero del  $C_5H_{12}$ . Se puede encontrar reduciendo la cadena más larga a sólo tres carbonos y uniendo dos ramificaciones, de un carbono cada una, al carbono intermedio.



Si se completan las valencias con hidrógenos, el carbono del centro no presenta ningún hidrógeno unido a él.

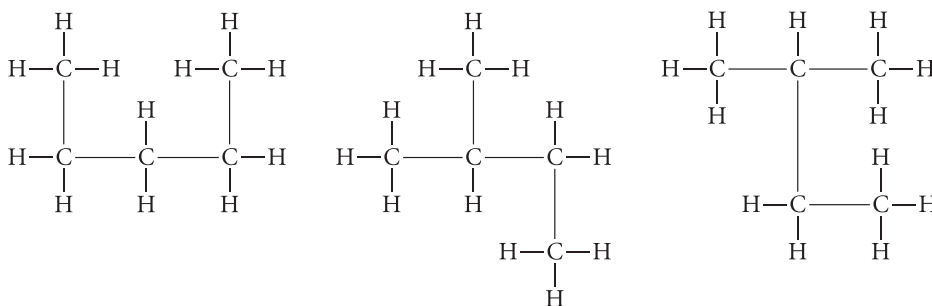


2,2-dimetilpropano, p.e. 10°C  
(neopentano)

\*Utilizando los modelos moleculares (véase nota p. 41) para construir las cadenas de carbono como se han dibujado, podrá diferenciar qué representaciones son idénticas y cuáles son diferentes.

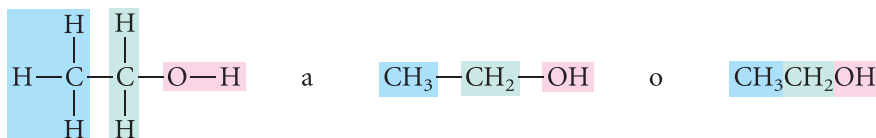
Así pues, se pueden dibujar tres (y sólo tres) fórmulas estructurales diferentes que corresponden a la fórmula molecular  $C_5H_{12}$ , de hecho, se conocen solamente tres sustancias químicas distintas con esta fórmula. Comúnmente reciben los nombres de *n*-pentano (la letra *n*, normalmente, se utiliza con cadenas no ramificadas de carbono), isopentano, y neopentano.

**PROBLEMA 1.21** De las siguientes fórmulas estructurales, ¿a qué isómero de  $C_5H_{12}$  corresponde cada una de ellas?

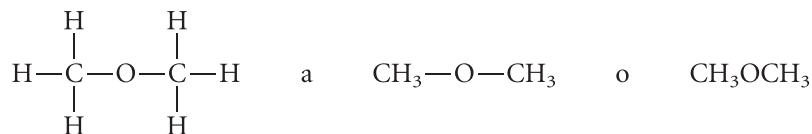


## 1.10 Fórmulas estructurales abreviadas

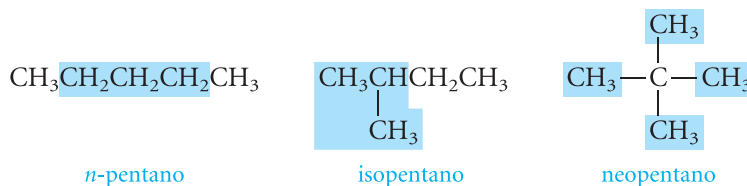
Las fórmulas estructurales como se han escrito hasta ahora son útiles, pero también son algo incómodas. Consumen mucho espacio y son pesadas de escribir. Por consiguiente, a menudo se utilizan fórmulas más cortas que conllevan todavía el significado de las fórmulas estructurales. Por ejemplo, se puede abreviar la fórmula estructural del etanol (alcohol etílico) de:



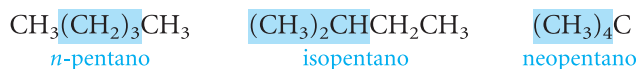
Sin duda, cada una de las fórmulas representan al etanol y no a su isómero metoximetano (éter dimetílico), que se puede representar por cualquiera de las estructuras siguientes:



Las fórmulas estructurales para los tres pentanos se pueden abreviar de manera similar.



A veces estas fórmulas se abrevian todavía más. Por ejemplo, se pueden escribir en una línea sola de la siguiente manera:

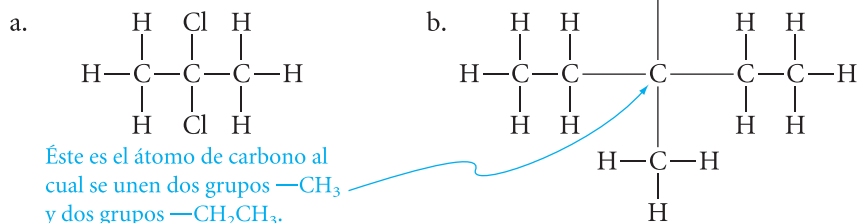




**EJEMPLO 1.11**

Escriba una fórmula estructural que muestre todos los enlaces para cada una de las siguientes fórmulas abreviadas:

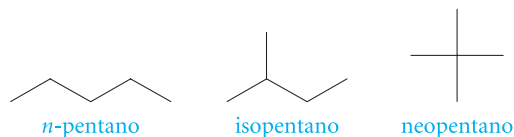
- a.  $\text{CH}_3\text{CCl}_2\text{CH}_3$       b.  $(\text{CH}_3)_2\text{C}(\text{CH}_2\text{CH}_3)_2$

**SOLUCIÓN**

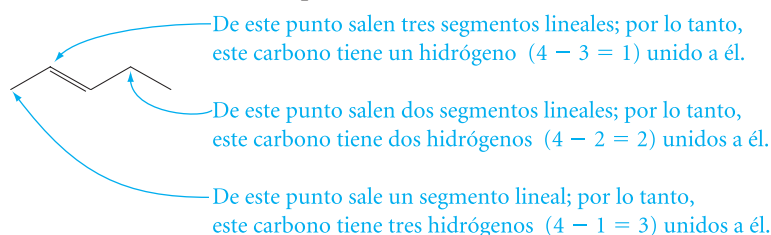
**PROBLEMA 1.22** Escriba una fórmula estructural que muestre todos los enlaces para cada una de las siguientes fórmulas abreviadas:

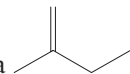
- a.  $(\text{CH}_3)\text{CHCH}_2\text{OH}$       b.  $\text{Cl}_2\text{C}=\text{CCl}_2$

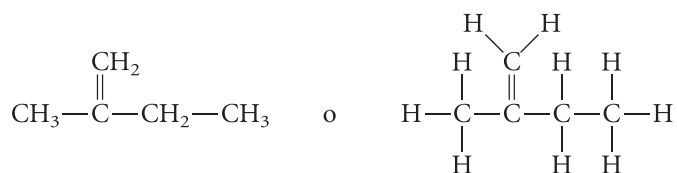
Quizás la última simplificación de estructuras sea el uso de líneas para representar bloques de carbonos:

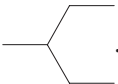


En estas fórmulas, se supone que cada segmento lineal tiene un átomo de carbono en cada extremo. Los hidrógenos se omiten, pero se puede calcular rápidamente el número de hidrógenos sobre cada carbono restando a cuatro (la valencia de carbono) el número de segmentos lineales que salen desde cualquier punto. Los enlaces múltiples se representan por segmentos lineales múltiples. Por ejemplo, el hidrocarburo con una cadena de cinco átomos de carbono y un enlace doble entre el segundo y el tercer átomo de carbono (es decir,  $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{CH}_3$ ) se representa así:

**EJEMPLO 1.12**

Escriba una fórmula estructural más detallada para .

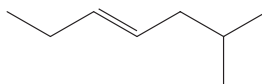
**SOLUCIÓN**

**PROBLEMA 1.23** Escriba una fórmula estructural más detallada para .

### EJEMPLO 1.13

Escriba una fórmula de segmentos lineales para  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ .

**SOLUCIÓN**



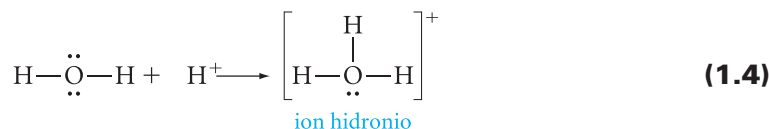
**PROBLEMA 1.24** Escriba una fórmula de segmentos lineales para:



## 1.11 Carga formal

Hasta ahora se han considerado sólo moléculas cuyos átomos son neutros. Pero en algunas moléculas, uno o más átomos pueden estar cargados, positiva o negativamente. Generalmente, estas cargas afectan a las reacciones químicas de las moléculas, por lo que es importante saber dónde se localizan dichas cargas.

Considere la fórmula para el ion hidronio,  $\text{H}_3\text{O}^+$ , que es el producto de la reacción de una molécula de agua con un protón.



La estructura tiene ocho electrones alrededor del oxígeno y dos electrones alrededor de cada hidrógeno, para completar todas las capas de valencia. Observe que hay, en total, ocho electrones de valencia. El oxígeno contribuye con seis, y cada hidrógeno contribuye con uno, lo que daría un total de nueve, pero como el ion tiene una carga positiva, significa que se ha liberado un electrón, resultando ocho. Seis de estos ocho electrones se usan para formar tres enlaces sencillos  $\text{O}-\text{H}$ , dejando un par de electrones no compartido sobre el oxígeno.

Aunque es el ion hidronio completo el que tiene una carga positiva, interesa saber, “¿que átomo, soporta formalmente la carga?”. Para determinar la **carga formal**, se supone que cada átomo “posee” *todos* sus electrones no repartidos más *la mitad* de sus electrones compartidos (un electrón de cada enlace covalente). A continuación se resta este número del número total de electrones de valencia en el átomo neutro obteniéndose así la carga formal. Esta definición puede expresarse en forma de ecuación, como sigue:

$$\text{Carga formal} = \text{número de electrones de valencia del átomo neutro} - \left( \text{electrones no compartidos} + \frac{\text{mitad de electrones compartidos}}{2} \right) \quad (1.5)$$

O bien en una forma simplificada,

$$\text{Carga formal} = \text{número de electrones de valencia en el átomo neutro} - (\text{puntos} + \text{enlaces})$$

A continuación se va a aplicar esta definición al ion hidronio.

*Para cada átomo de hidrógeno:*

Número de electrones de valencia en el átomo neutro	=	1
Número de electrones no compartidos	=	0
Mitad del número de electrones compartidos	=	1
Por lo tanto, la carga formal	=	$1 - (0 + 1) = 0$

La **carga formal** de un átomo en una molécula covalente o en un ion es el número de electrones de valencia del átomo neutro menos el número de enlaces covalentes del átomo y menos el número de electrones no compartidos de dicho átomo.

Para el átomo de oxígeno:

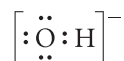
Número de electrones de valencia en el átomo neutro	= 6
Número de electrones no compartidos	= 2
Mitad del número de electrones compartidos	= 3
Por lo tanto, la carga formal	= $6 - (2 + 3) = +1$

En el ion hidronio es el átomo de oxígeno el que soporta formalmente la carga de +1.

### EJEMPLO 1.14

¿Cuál es el átomo que soporta la carga formal en el ion hidróxido,  $\text{OH}^-$ ?

**SOLUCIÓN** La fórmula de Lewis es:



El oxígeno contribuye con seis electrones, el hidrógeno contribuye con uno, y tiene uno más por la carga negativa, lo que proporciona un total de ocho electrones. La carga formal sobre el oxígeno es  $6 - (6 + 1) = -1$ , de modo que el oxígeno lleva la carga negativa. El hidrógeno es neutro.

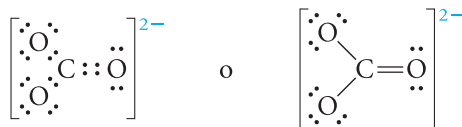
**PROBLEMA 1.25** Calcule la carga formal sobre el átomo de nitrógeno en el amoníaco,  $\text{NH}_3$ ; en el ion amonio,  $\text{NH}_4^+$ ; y en el ion amiduro,  $\text{NH}_2^-$ .

A continuación se van a analizar situaciones ligeramente más complejas que implican las estructuras de Lewis y la carga formal.

## 1.12 Resonancia

En las estructuras de Lewis, un par de puntos o una raya representa un enlace entre dos átomos. Pero a veces, en el proceso de formación de enlaces, un par de electrones resulta involucrado con más de dos átomos. Las moléculas y los iones en los que esto ocurre no se pueden representar adecuadamente utilizando una sola estructura de Lewis. Como ejemplo, considere la estructura del ion carbonato,  $\text{CO}_3^{2-}$ .

El número total de electrones de valencia en el ion carbonato es de 24 (4 del carbono,  $3 \times 6 = 18$  de los tres oxígenos, más 2 electrones adicionales que le confieren la carga negativa al ion; probablemente estos 2 electrones han sido cedidos por algún metal, quizás cada uno procede de un átomo de sodio). Una estructura de punto-electrón que completa la capa de valencia con ocho electrones alrededor del carbono y de cada oxígeno es:

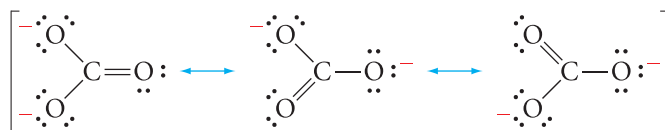


ión carbonato,  $\text{CO}_3^{2-}$

La estructura contiene dos enlaces sencillos carbono-oxígeno y un doble enlace carbono-oxígeno. Al aplicar la definición de la carga formal se observa que el carbono es formalmente neutro, cada uno de los oxígenos con enlace sencillo tiene una carga formal de  $-1$ , y el oxígeno con doble enlace es formalmente neutro.

**PROBLEMA 1.26** Demuestre que la última frase del párrafo anterior es correcta.

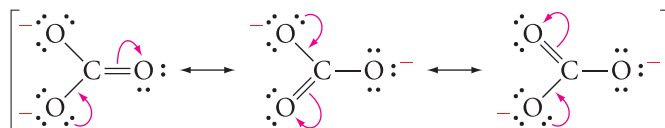
Cuando se escribe la estructura de Lewis para el ion carbonato, se puede escoger arbitrariamente qué átomo de oxígeno quedará unido al átomo de carbono a través de un enlace doble. De hecho existen *tres* estructuras *exactamente equivalentes* que se pueden escribir.



tres estructuras equivalentes para el ión carbonato

En cada estructura hay un enlace C=O y dos enlaces C—O. Estas estructuras tienen la misma disposición de átomos. Difieren unas de otras *sólo* en la disposición de los electrones.

A continuación se presentan nuevamente las tres estructuras para el ion carbonato, utilizando flechas curvas para mostrar el movimiento de los pares de electrones para convertir una estructura en otra:

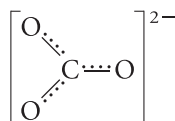


Los químicos utilizan flechas curvas para señalar un cambio en la posición de los electrones. En la Sección 1.13 se proporciona una explicación detallada del empleo de las flechas curvas.

A través de mediciones físicas se ha comprobado que *ninguna de las estructuras precedentes describe con exactitud al verdadero ion carbonato*. Por ejemplo, a pesar de que cada una de las estructuras muestra dos tipos diferentes de enlaces entre el carbono y el oxígeno, experimentalmente se ha encontrado que *las tres longitudes del enlace oxígeno-carbono son idénticas: 1,31 Å*. Esta distancia es intermedia entre los valores de la longitud de los enlaces normales C=O (1,20 Å) y C—O (1,41 Å). Para explicar este hecho, por lo general se dice que el verdadero ion carbonato tiene una estructura que es un **híbrido de resonancia** de las tres **estructuras de resonancia** contribuyentes. Es como si fuera un promedio de las tres estructuras. En el ion carbonato real, las dos cargas formales negativas se extienden *por igual* sobre los tres átomos de oxígeno, de tal manera que cada átomo de oxígeno soporta las dos terceras partes de la carga negativa. Conviene señalar que el ion carbonato no se encuentra físicamente en equilibrio entre las tres estructuras resonantes, si no que, de hecho, tiene una estructura híbrida entre las tres estructuras resonantes.

Siempre que se puedan escribir, para una misma molécula, dos o más estructuras con diferentes disposiciones de electrones, pero con idéntica distribución de átomos, se dice que estas estructuras son *estructuras de resonancia*. La resonancia es muy diferente a la isomería, en la cual los átomos se ordenan de forma distinta. Cuando se presenta resonancia, se dice que la sustancia tiene una estructura que es un híbrido de resonancia de todas las estructuras contribuyentes. Se utiliza una flecha con doble cabeza ( $\longleftrightarrow$ ) entre las estructuras contribuyentes para distinguir la resonancia de un equilibrio entre compuestos diferentes, para el cual se utiliza  $\rightleftharpoons$ .

Cada enlace carbono-oxígeno en el ion carbonato no es ni sencillo, ni doble, sino algo intermedio —quizás uno más un tercio de enlace (cualquiera de los enlaces carbono-oxígeno se presenta como sencillo en dos de las estructuras contribuyentes y como doble, en la otra)—. A veces, un híbrido de resonancia se representa con una fórmula, en la que se utiliza una línea normal para cada enlace completo y una línea de puntos para cada enlace parcial (en el ion carbonato, los puntos representan un tercio de un enlace).



híbrido de resonancia de ión de carbonato

Las **estructuras resonantes** de una molécula o ion son dos o más estructuras con idéntica disposición de átomos, pero con diferente disposición de electrones. Si se pueden escribir las estructuras resonantes, la verdadera estructura de la molécula o del ion es un **híbrido de resonancia** de todas las estructuras de resonancia contribuyentes.

**PROBLEMA 1.27** Dibuje las tres estructuras resonantes equivalentes que contribuyen a la estructura de resonancia del ion nitrato,  $\text{NO}_3^-$ . ¿Cuál es la carga formal del átomo de nitrógeno y la de cada átomo de oxígeno en las estructuras individuales? ¿Cuál es la carga de los oxígenos y del nitrógeno en la estructura del híbrido de resonancia? Muestre con flechas curvas la interconversión de las estructuras.

## 1.13 Formalismo de las flechas

En las estructuras químicas las flechas tienen un significado específico. Por ejemplo, en la Sección 1.12 se utilizan flechas curvas para mostrar el movimiento de los electrones que relacionan las tres estructuras de resonancia del ion carbonato. Así como es importante conocer las relaciones estructurales y los nombres de las moléculas, en química orgánica también es importante aprender el lenguaje del formalismo de las flechas.

Las **flechas curvas** muestran el movimiento de electrones en las estructuras de resonancia y en las reacciones.

1. Las **flechas curvas** se utilizan para mostrar el movimiento de electrones en estructuras de resonancia y en reacciones. De esta manera, las flechas curvas siempre comienzan en la posición inicial de los electrones y terminan en su posición final. En el ejemplo que se muestra a continuación, en la estructura de la izquierda, la flecha que se dirige desde el enlace  $\text{C}=\text{O}$  al átomo de oxígeno indica que los dos electrones en uno de los enlaces covalentes entre el carbono y el oxígeno se mueven hacia el átomo de oxígeno:

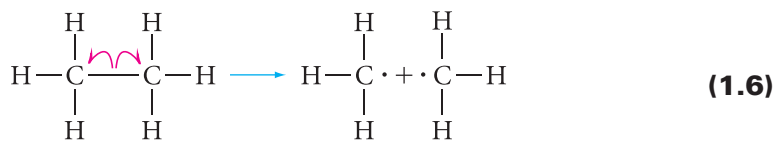


Como puede observarse, en la estructura de la derecha el átomo de carbono tiene ahora una carga formal positiva, y el oxígeno tiene una carga formal negativa. También se debe observar que, en un enlace covalente polar, cuando se mueve un par de electrones hacia uno de los átomos enlazados, *el movimiento va hacia el átomo más electronegativo*, en este caso el oxígeno. En el ejemplo siguiente, en la estructura de la izquierda, la flecha que se dirige desde el par no compartido de electrones del átomo de oxígeno hacia un punto entre los átomos de carbono y de oxígeno indica que el par de electrones no compartido del átomo de oxígeno se mueve para formar un enlace covalente entre los átomos de oxígeno y de carbono:



Note que tanto el carbono como el oxígeno tienen cargas formales de 0 en la estructura de la derecha.

Una flecha curva con media cabeza recibe el nombre de **media flecha**. Esta clase de flecha se utiliza para indicar el movimiento de un solo electrón. En la Ecuación 1.6, se utilizan dos medias flechas para mostrar el movimiento de cada uno de los dos electrones del enlace  $\text{C}-\text{C}$  del etano hacia un átomo de carbono, para formar dos radicales metilo (véase Ecuación 1.3):



Las **medias flechas** indican el movimiento de un solo electrón.

Las **flechas directas** se dirigen desde los reactivos hacia los productos en las ecuaciones químicas.

2. Las **flechas directas** se dirigen desde los reactivos hacia los productos en las ecuaciones químicas. Un ejemplo lo constituye la flecha directa que se dirige desde el etano hacia los dos radicales metilo en la Ecuación 1.6. Las flechas directas con

media cabeza se utilizan frecuentemente por pares para indicar que una reacción es reversible.



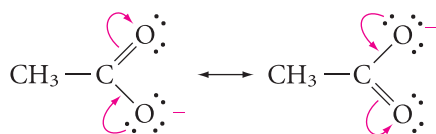
Una **flecha directa con doble cabeza** entre dos estructuras indica que son estructuras de resonancia. Esta flecha no indica la existencia de una reacción química. Las flechas con cabeza doble entre estructuras de resonancia (Sección 1.12) para el enlace C=O se muestran en la parte superior.

Una **flecha directa con doble cabeza** entre dos estructuras indica que son estructuras resonantes.

### EJEMPLO 1.15

Utilizando el formalismo de flechas correcto, escriba los contribuyentes a la estructura del híbrido de resonancia del ion de acetato,  $\text{CH}_3\text{CO}_2^-$ . Señale cualquier carga formal.

**SOLUCIÓN** Existen dos estructuras de resonancia equivalentes para el ion acetato. Cada una tiene una carga formal negativa sobre uno de los átomos de oxígeno.



Como puede observarse cuando se mueve un par de electrones del oxígeno para formar un enlace covalente con el carbono, se mueve hacia el oxígeno un par electrónico de uno de los enlaces covalentes entre el carbono y el otro átomo de oxígeno. Es necesario asegurarse que el átomo de carbono no excede su valencia de 4.

**PROBLEMA 1.28** Utilizando el formalismo de las flechas correcto, escriba los contribuyentes a la estructura del híbrido de resonancia del ion azida, un ion lineal formado por la unión de tres nitrógenos,  $\text{N}^{3-}$ . Indique la carga formal sobre cada átomo de nitrógeno.

A lo largo de todo el texto se van a utilizar flechas curvas para mostrar el movimiento de los electrones. Para ayudar al lector a dibujarlas, al final de este capítulo se incluyen problemas en los que se utilizan flechas curvas.

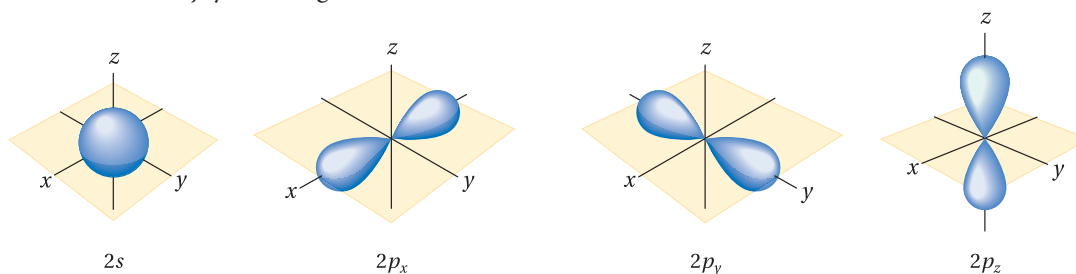
## 1.14 La visión orbital de los enlaces: El enlace sigma

Aunque las estructuras de Lewis a menudo son de gran utilidad, presentan algunas carencias. La propia teoría de Lewis acerca del enlace tiene sus limitaciones, especialmente para explicar la geometría tridimensional de las moléculas. Para este propósito en particular, se va a analizar otra teoría del enlace, que involucra los orbitales y es más útil.

Los orbitales atómicos que se mencionan en la Sección 1.1 tienen formas bien definidas. Los orbitales  $s$  son esféricos. Los electrones que ocupan un orbital  $s$  limitan su movimiento a una región espacial esférica alrededor del núcleo. Los tres orbitales  $p$  lobulares son mutuamente perpendiculares, y se orientan a lo largo de los tres ejes de coordenadas,  $x$ ,  $y$  y  $z$ . La Figura 1.2 muestra las formas de estos orbitales.

**FIGURA 1.2**

Formas de los orbitales  $s$  y  $p$  utilizados por los electrones de valencia del carbono. El núcleo se encuentra en el origen de los tres ejes de coordenadas.

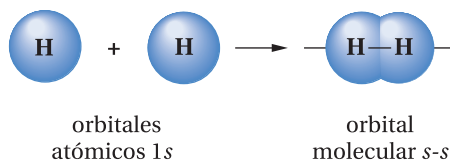


Según la visión orbital del enlace, los átomos se acercan el uno al otro de tal modo que sus orbitales atómicos pueden *solapar* para formar un enlace. Por ejemplo, si se combinan dos átomos de hidrógeno para formar una molécula de hidrógeno, sus dos orbitales esféricos  $1s$  se combinan para formar un nuevo orbital que abarca ambos átomos (véase Figura 1.3). Este orbital contiene los dos electrones de valencia (uno de cada hidrógeno). Al igual que los orbitales atómicos, cada **orbital molecular** puede contener como máximo dos electrones. En la molécula de hidrógeno estos electrones se encuentran, principalmente, en el espacio que hay entre los dos núcleos.

Un **orbital molecular** es el espacio ocupado por los electrones de una molécula.

### FIGURA 1.3

Representación del orbital molecular de un enlace covalente formado entre dos átomos de hidrógeno.

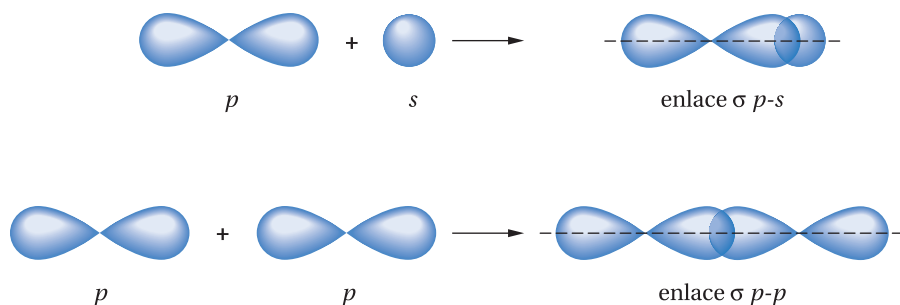


El orbital de la molécula de hidrógeno es cilíndricamente simétrico a lo largo del eje internuclear H—H. Dichos orbitales reciben el nombre de **orbitales sigma** ( $\sigma$ ), y el enlace se nombra como **enlace sigma**. Los enlaces sigma también se pueden formar por el solapamiento de un orbital  $s$  y un orbital  $p$  o de dos orbitales  $p$ , como se muestra en la Figura 1.4\*.

Un **orbital sigma** ( $\sigma$ ) se extiende a lo largo del eje que une dos átomos; se denomina enlace sigma al par de electrones que ocupan el orbital sigma.

### FIGURA 1.4

Solapamiento de orbitales para formar enlaces  $\sigma$ .

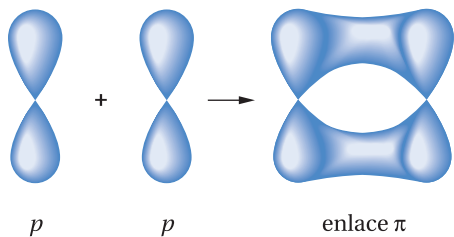


A continuación se van a aplicar estas ideas a los enlaces de los compuestos de carbono.

## 1.15 Orbitales híbridos $sp^3$ del átomo de carbono

En un átomo de carbono, los seis electrones se colocan como se muestra en la Figura 1.5 (compárese con el carbono en la Tabla 1.2). La capa  $1s$  está completa, y los cuatro electrones de valencia se encuentran en el orbital  $2s$  y en dos orbitales  $2p$  diferentes. En la Figura 1.5 conviene destacar la escala de energía que aparece a la izquierda y representa la energía de los electrones en orbitales diferentes. Cuánto más alejado está el electrón del núcleo, mayor es su energía potencial, ya que se necesita energía para mantener separados el electrón (cargado negativamente) y el núcleo (cargado positivamente). El orbital  $2s$  tiene una energía ligeramente inferior que la de los tres orbitales  $2p$ , que tienen energías

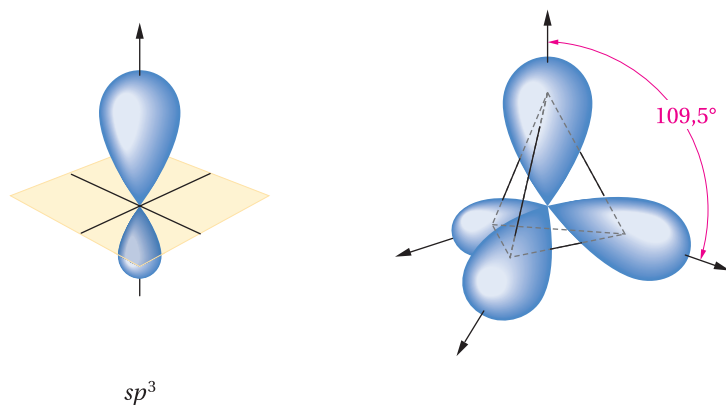
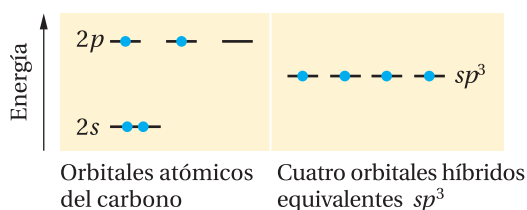
\*Dos orbitales  $p$  correctamente alineados también pueden solapar para formar otro tipo de enlace, llamado enlace  $\pi$  (pi). Este tipo de enlace se estudiará en el Capítulo 3.



iguales (sólo se diferencian uno de otro en la orientación alrededor del núcleo, como se muestra en la Figura 1.2). Los dos electrones de energía más altos se colocan en orbitales  $2p$  diferentes en vez de estar en el mismo orbital, ya que de esta manera, se mantienen lo más alejados posible reduciendo así la repulsión entre partículas igualmente cargadas. Uno de los orbitales  $p$  queda vacante.

La Figura 1.5 podría sugerir una idea equivocada con respecto a los enlaces del carbono. Por ejemplo, se podría pensar que el carbono forma sólo dos enlaces (para completar los orbitales  $2p$  parcialmente llenos) o bien, que forma tres enlaces (si algún átomo donara dos electrones al orbital  $2p$  vacío). Se sabe, por experiencia, que esta idea es errónea. El carbono por lo general forma *cuatro* enlaces sencillos, y a menudo estos enlaces son todos equivalentes, como en el caso del  $\text{CH}_4$  o del  $\text{CCl}_4$ . ¿Cómo se puede resolver esta discrepancia entre la teoría y los hechos?

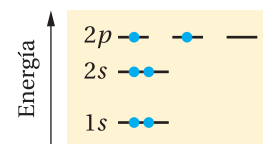
Una solución, ilustrada en la Figura 1.6, consiste en mezclar o combinar los cuatro orbitales atómicos de la capa de valencia para formar cuatro orbitales híbridos idénticos, cada uno con un electrón de valencia. Según este modelo, los orbitales híbridos reciben el nombre de **orbitales híbridos  $sp^3$**  debido a que cada uno tiene una parte de carácter  $s$  y tres partes de carácter  $p$ . Como se muestra en la Figura 1.6, cada orbital  $sp^3$  tiene la misma energía: menor que la de los orbitales  $2p$  pero mayor que la del orbital  $2s$ . La forma de los orbitales  $sp^3$  se parece a la de los orbitales  $p$ , pero uno de los lóbulos es más pequeño, y es más probable encontrar a los electrones en el lóbulo que se extiende a mayor distancia del núcleo, como aparece en la Figura 1.7. Los cuatro orbitales híbridos  $sp^3$  de un átomo de carbono se dirigen hacia los vértices de un tetraedro regular, también mostrados en la Figura 1.7. Esta geometría, en particular, coloca cada orbital lo más alejado posible de los otros tres orbitales y así se reduce al mínimo la repulsión cuando los orbitales se llenan de pares de electrones. El ángulo entre dos de los cuatro enlaces formados con orbitales  $sp^3$  es de aproximadamente  $109,5^\circ$ , que es el ángulo formado al dibujar líneas que van del centro a las esquinas de un tetraedro regular.



Los orbitales híbridos pueden formar enlaces sigma por solapamiento con otros orbitales híbridos o con orbitales atómicos sin hibridar. La Figura 1.8 muestra algunos ejemplos.

**FIGURA 1.5**

Distribución de los seis electrones de un átomo de carbono. Cada punto representa un electrón.



Un orbital híbrido  $sp^3$  tiene una forma similar a la del orbital  $p$  con una parte de carácter  $s$  y tres partes de carácter  $p$ .

**FIGURA 1.6**

Orbitales sin hibridar del carbono. Los puntos representan electrones. (Sólo se muestran los electrones de la capa de valencia; los electrones del orbital  $1s$  no se representan ya que no están implicados en el enlace).

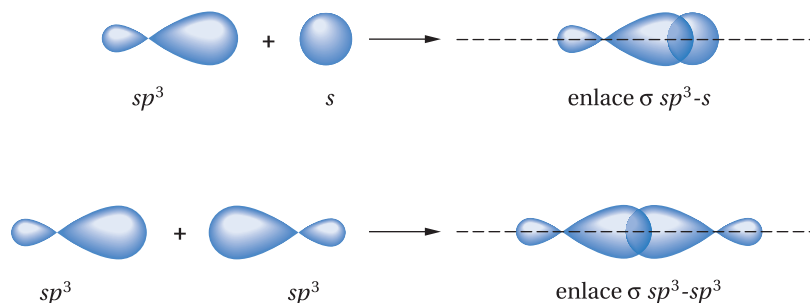
**FIGURA 1.7**

Un orbital  $sp^3$  se extiende principalmente desde el núcleo en una dirección y forma enlaces con otros átomos en esa dirección. Los cuatro orbitales  $sp^3$  de cualquier átomo de carbono están dirigidos hacia las esquinas de un tetraedro regular, como se muestra en la parte derecha de la figura (en esta parte del dibujo, los pequeños lóbulos "traseros" de los orbitales se han omitido para simplificar, aunque pueden tener su importancia en las reacciones químicas).



■ FIGURA 1.8

Ejemplos de enlaces sigma ( $\sigma$ ) formados con orbitales híbridos  $sp^3$ .



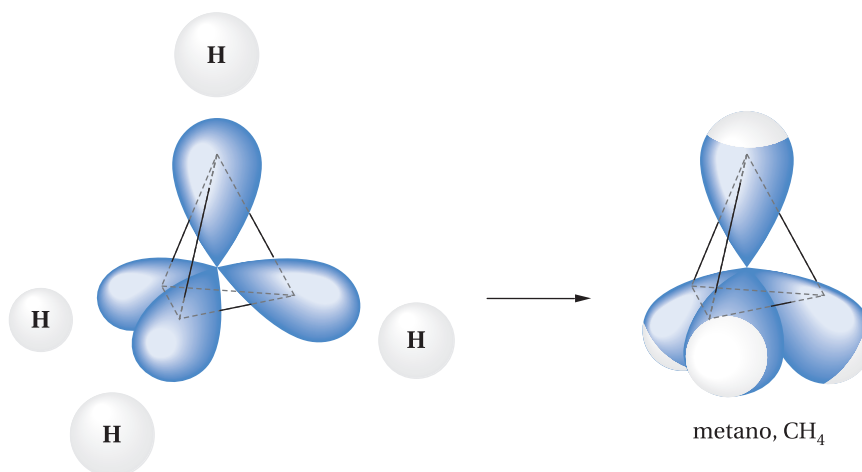
## 1.16 El carbono tetraédrico: Los enlaces en el metano

Ahora se puede explicar cómo se combina un átomo de carbono con cuatro átomos de hidrógeno para formar el metano. Este proceso se representa en la Figura 1.9. El átomo de carbono se une a cada átomo de hidrógeno mediante un enlace sigma, que se forma por solapamiento de un orbital  $sp^3$  del carbono con un orbital  $1s$  del hidrógeno. Los cuatro enlaces sigma se dirigen desde el núcleo de carbono a los vértices de un tetraedro regular. De este modo, el par de electrones en cualquier enlace experimenta la mínima repulsión con los electrones de los otros enlaces. Todos los **ángulos de enlace** H—C—H son iguales,  $109,5^\circ$ . Para resumir, en el metano hay cuatro enlaces sigma  $sp^3-s$  C—H, cada uno dirigido desde el átomo de carbono hacia uno de los cuatro vértices de un tetraedro regular.

Un **ángulo de enlace** es el ángulo formado entre dos enlaces covalentes de un mismo átomo.

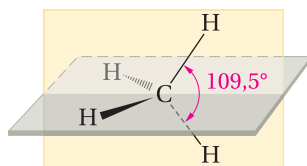
■ FIGURA 1.9

La molécula de metano,  $CH_4$ , se forma por solapamiento de cuatro orbitales  $sp^3$  del carbono con cuatro orbitales  $1s$  de cuatro átomos de hidrógeno. La molécula resultante tiene la geometría de un tetraedro regular y contiene cuatro enlaces sigma del tipo  $sp^3-s$ .

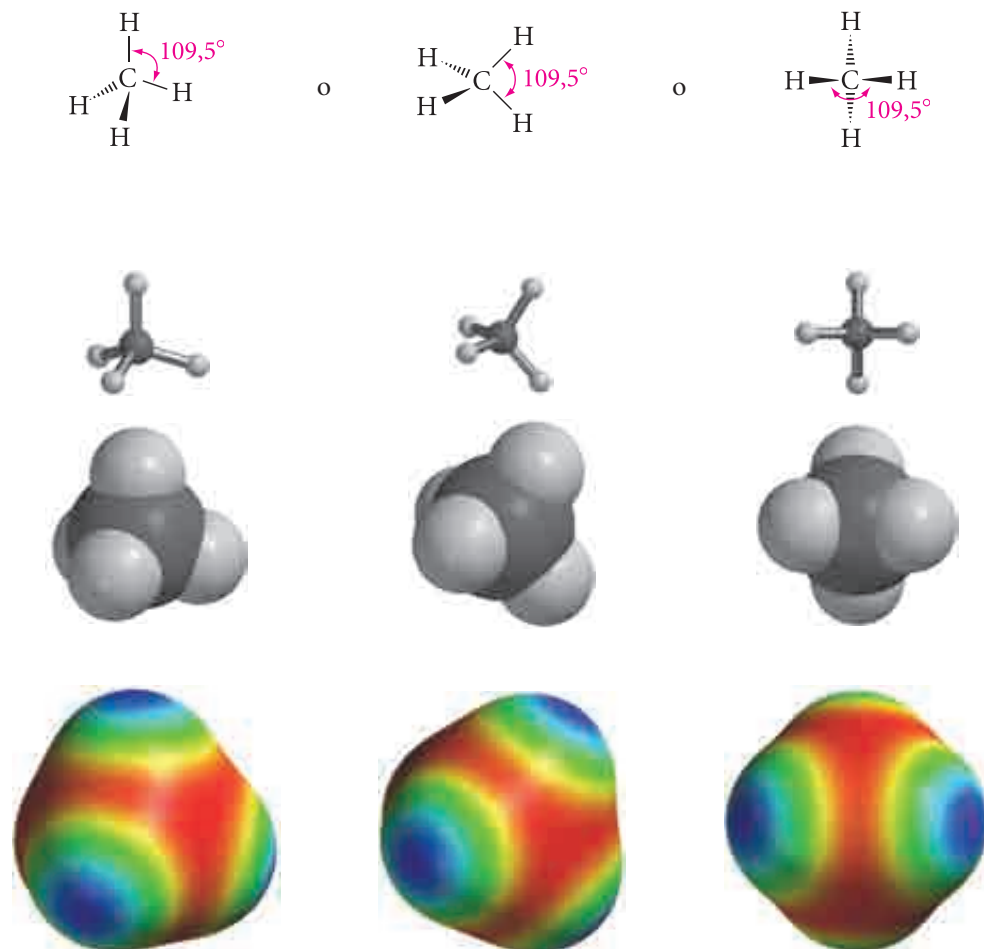


**PROBLEMA 1.29** Considerando la repulsión que existe entre electrones de enlaces diferentes, explique razonadamente por qué sería menos estable una geometría plana para el metano que la geometría tetraédrica.

Debido a que la geometría tetraédrica del carbono juega un papel muy importante en química orgánica, es aconsejable familiarizarse con las características de un tetraedro regular. Una de estas características es que *el centro y dos vértices cualquiera de un tetraedro forman un plano que bisecta perpendicularmente a otro plano similar formado por el centro y otros dos vértices*. En el metano, por ejemplo, dos hidrógenos cualquiera y el carbono forman un plano que bisecta perpendicularmente al plano formado por el carbono y los otros dos hidrógenos. Estos planos se muestran en la Figura 1.10.



La geometría del carbono con cuatro enlaces sencillos, como en el metano, se representa comúnmente como se muestra en la Figura 1.11a en donde las **líneas continuas** están en el plano de la página, las **cuñas punteadas** van hacia detrás del plano del papel, y la **cuña continua** se orienta del plano del papel hacia el lector. Las estructuras dibujadas de este modo reciben el nombre de estructuras 3D (es decir, en tres dimensiones).



**FIGURA 1.11**  
Cuatro representaciones del metano.

Otras dos representaciones 3D que se utilizan frecuentemente son el modelo de bolas y varillas (Figura 1.11b) y el modelo espacial (Figura 1.11c). El modelo de bolas y varillas señala los enlaces que conectan a los átomos, mientras el modelo espacial señala el espacio ocupado por los átomos.

Además, a veces se utiliza una representación 3D, llamada **mapa de potencial electrostático**, para mostrar la distribución electrónica en una molécula (Figura 1.11d). En rojo se muestra la carga parcial negativa (mayor densidad de electrones), y en azul se indica la carga parcial positiva (menor densidad de electrones). Esta representación es útil para mostrar si una molécula es polar o apolar (véase Sección 2.7) y puede dar una idea acerca del comportamiento químico de una molécula, como se verá al revisar la química de los grupos funcionales en capítulos posteriores.

**FIGURA 1.10**

El carbono y dos de los hidrógenos del metano forman un plano que biseca perpendicularmente al plano formado por el carbono y los otros dos hidrógenos.

(a) En una **estructura 3D**, las **líneas continuas** permanecen en el plano del papel (el C y el H en C—H permanecen en el plano). Las **cuñas punteadas** se dirigen hacia atrás del plano (el H en C—H se dirige hacia atrás del plano). Las **cuñas continuas** se dirigen hacia el lector (el H en C—H está delante del plano).

(b) El **modelo de bolas y varillas** de una molécula marca los enlaces que conectan los átomos.

(c) El **modelo espacial** señala el espacio ocupado por los átomos.

(d) Un **mapa de potencial electrostático** muestra la distribución electrónica de una molécula. En rojo se indica la carga parcial negativa, y en azul se indica la carga parcial positiva.

Una vez descritos los enlaces covalente sencillos y su geometría, se podrá abordar, en el siguiente capítulo, la estructura y la química de los hidrocarburos saturados. Pero antes de ello, se va a presentar una descripción breve de la química orgánica, para apreciar cómo se organizan los temas para su estudio.

Como consecuencia de que el carbono puede unirse con otros carbonos o bien con otros átomos en formas muy diferentes, el número de posibles compuestos orgánicos es casi ilimitado. Se han caracterizado, literalmente, millones de compuestos orgánicos, y el número crece a diario. ¿Cómo se puede estudiar sistemáticamente algo tan extenso? Por suerte, los compuestos orgánicos pueden clasificarse de acuerdo con sus estructuras en un número de grupos relativamente pequeño. Las estructuras se pueden clasificar de dos maneras, de acuerdo con el esqueleto molecular (a veces llamado esqueleto carbonado) y de acuerdo con los grupos que están unidos a dichos esqueletos.

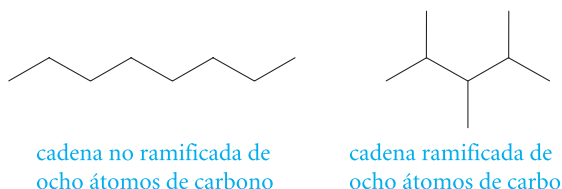
## 1.17 Clasificación de acuerdo con el esqueleto molecular

Los tres principales tipos de esqueletos moleculares para estructuras orgánicas son acíclicos, carbocíclicos y compuestos heterocíclicos.

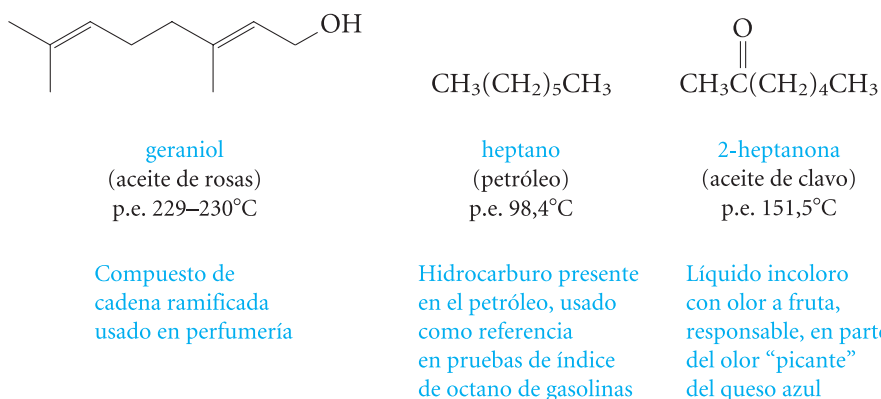
### 1.17.a Compuestos acíclicos

Los **compuestos acíclicos** no contienen anillos. Los **compuestos carbocíclicos** contienen anillos de átomos de carbono. Los **compuestos heterocíclicos** presentan anillos que contienen al menos un átomo que *no* es de carbono.

**Acíclico** significa *no cíclico*. Las moléculas orgánicas acíclicas tienen cadenas de átomos de carbono, pero no tienen anillos. Como se ha visto, las cadenas pueden ser no ramificadas o ramificadas.



El pentano es un ejemplo de un compuesto acíclico con una cadena no ramificada de carbono, mientras que el isopentano y el neopentano son también acíclicos, pero presentan una ramificación en el esqueleto de carbono (Sección 1.9). La Figura 1.12 muestra las estructuras de unos pocos compuestos acíclicos que aparecen en la naturaleza.

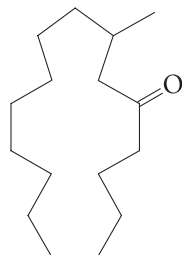


■ FIGURA 1.12

Ejemplos de compuestos acíclicos naturales, su origen (entre paréntesis), y algunas características.

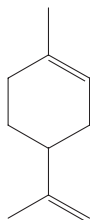
### 1.17.b Compuestos carbocíclicos

Los **compuestos carbocíclicos** contienen anillos de átomos de carbono. El anillo carbocíclico más pequeño posible tiene tres átomos de carbono, pero existen anillos de carbono de muchos tamaños y formas. Los anillos pueden presentar cadenas de átomos de carbono unidas y pueden contener enlaces múltiples. Se conocen muchos compuestos con más de un anillo carbocíclico. La Figura 1.13 muestra las estructuras de algunos de los compuestos carbocíclicos que aparecen en la naturaleza. Los anillos más comunes, son los de cinco o seis miembros, pero también se pueden encontrar anillos más pequeños y más grandes.



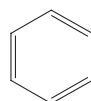
**muscona**  
(ciervo almizclero)  
p.e. 327–330°C

Cetona con anillo de 15 miembros, usado en perfumería



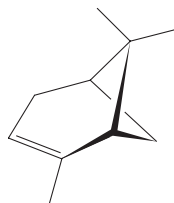
**limoneno**  
(aceite de cítricos)  
p.e. 178°C

Anillo con dos cadenas laterales, una de las cuales está ramificada



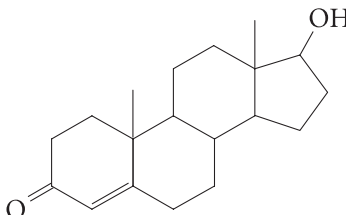
**benzeno**  
(petróleo)  
p.f. 5,5°C, p.e. 80,1°C

Anillo muy común



**α-pineno**  
(aguarrás)  
p.e. 156,2°C

Molécula bicíclica; se tendrían que romper dos enlaces, para hacerla acíclica



**testosterona**  
(esperma)  
p.e. 155°C

Hormona sexual masculina en la cual se encuentran fusionados varios anillos del mismo tamaño, es decir, comparten dos átomos de carbono adyacentes

**FIGURA 1.13**

Ejemplos de compuestos carbocíclicos naturales con anillos de varios tamaños y formas. Bajo cada estructura se indica su fuente y algunas características especiales.

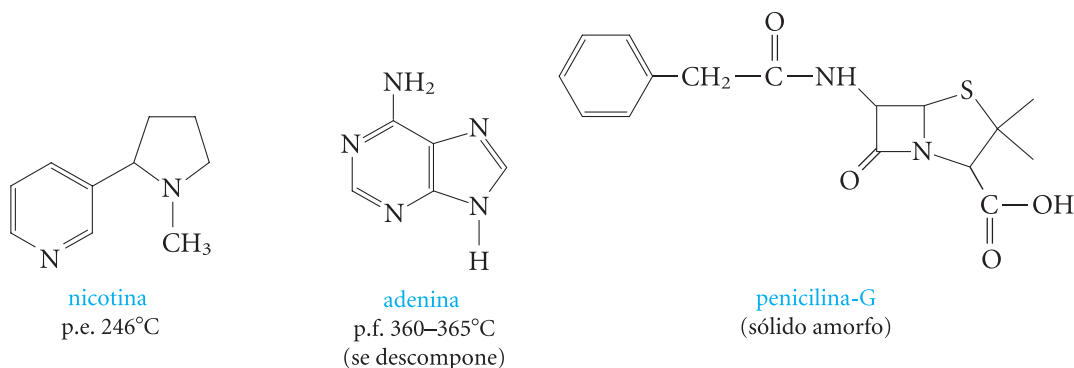
### 1.17.c Compuestos heterocíclicos

Los **compuestos heterocíclicos** constituyen la tercera y más amplia clase de esqueletos moleculares para los compuestos orgánicos. En los compuestos heterocíclicos, al menos un átomo del anillo debe ser un heteroátomo, un átomo que no es el carbono. Los heteroátomos más comunes son el oxígeno, el nitrógeno y el azufre, aunque también se conocen heterocíclicos con otros elementos. En un anillo se pueden presentar más de un heteroátomo, y de ser así, estos heteroátomos pueden ser iguales o diferentes. Puede haber anillos heterocíclicos de muchos tamaños, y pueden contener enlaces múltiples,

o presentar también, unidos a ellos, cadenas de carbono o anillos, es decir, pueden presentar una gran variedad de estructuras.

En la Figura 1.14 se presentan las estructuras de algunos productos naturales que contienen anillos heterocíclicos. En estas fórmulas estructurales abreviadas, se muestran los símbolos de los heteroátomos, pero los carbonos quedan indicados solamente mediante el uso de líneas.

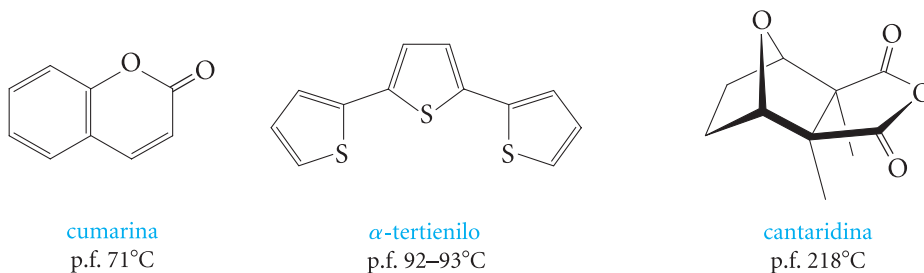
Las estructuras de las figuras 1.12 a la 1.14 muestran no sólo el esqueleto molecular sino también varios grupos de átomos que pueden formar parte de, o estar unidos a los esqueletos. Por suerte, estos grupos también se pueden clasificar de tal manera que se simplifica bastante el estudio de la química orgánica.



Se encuentra en el tabaco, la nicotina tiene dos anillos heterocíclicos de diferente tamaño, cada uno contiene un nitrógeno

Es una de las cuatro bases heterocíclicas del ADN, la adenina contiene dos anillos heterocíclicos fusionados, cada uno de los cuales contiene dos heteroátomos (nitrógeno)

Uno de los antibióticos más usados, la penicilina tiene dos anillos heterocíclicos, de los cuales el más pequeño es crucial para su actividad biológica



Se encuentra en el trébol y en la hierba, la cumarina produce el agradable olor del heno recién segado

Este compuesto, con tres anillos sulfurados unidos, está presente en ciertas especies de caléndula

Este compuesto, un heterociclo con oxígeno, es el principio activo en las cantarinas (también conocidas como mosca española), el material se aísla de ciertos escarabajos de la especie *Cantharis vesicatoria* y erróneamente se ha pensado que aumentan el deseo sexual

#### ■ FIGURA 1.14

Ejemplos de compuestos heterocíclicos naturales que presentan variedad de heteroátomos y de tamaños de anillo.

## 1.18 Clasificación de acuerdo con el grupo funcional

Ciertos grupos de átomos tienen propiedades químicas que sólo dependen en parte del esqueleto molecular al cual están unidos. Estos grupos de átomos reciben el nombre de **grupos funcionales**. El grupo hidroxilo, —OH, es un ejemplo de un grupo funcional, y los compuestos que presentan este grupo unido a un esqueleto de carbono se llaman alcoholes. En la mayoría de las reacciones orgánicas, ocurren algunos cambios químicos en el grupo funcional, mientras el resto de la molécula mantiene su estructura original. El hecho de que la mayor parte de la estructura molecular se mantenga sin cambio frente a una reacción química simplifica enormemente el estudio de la química orgánica. Esto permite centrar la atención en la química de varios grupos funcionales. Se pueden estudiar diferentes tipos de compuestos en lugar de tener que aprender la química de cada compuesto individual.

Algunos grupos funcionales principales que se estudiarán aparecen en la Tabla 1.6, junto con un compuesto típico de cada clase. Aunque se van a estudiar estas clases de compuestos en capítulos posteriores con mayor detalle, es de gran utilidad familiarizarse con sus nombres y estructuras desde ahora. Si se menciona un determinado grupo funcional antes de haber analizado su química detalladamente, y el lector lo ha olvidado, se puede consultar la Tabla 1.6 o las del final del libro.

Los **grupos funcionales** son grupos de átomos que tienen propiedades químicas características independientemente del esqueleto molecular al que están unidos.

**PROBLEMA 1.30** ¿Qué grupos funcionales pueden encontrarse en los siguientes productos naturales? (Sus fórmulas se encuentran en las figuras 1.12 y 1.13).

- a. geraniol      b. 2-heptanona      c. limonelo      d. testosterona

**TABLA 1.6 PRINCIPALES GRUPOS FUNCIONALES**

	Estructura	Clase de compuesto	Ejemplo específico	Nombre común del ejemplo específico
<i>A. Grupos funcionales que forman parte del esqueleto molecular</i>		alcano	CH <sub>3</sub> —CH <sub>3</sub>	etano, un componente del gas natural
		alqueno	CH <sub>2</sub> =CH <sub>2</sub>	etileno, utilizado en la manufactura del etileno
		alquino	HC≡HC	acetileno, utilizado para soldar
		areno		benceno materia prima del benceno y del fenol
<i>B. Grupos funcionales que contienen oxígeno</i>				
	<i>1. Con enlaces sencillos carbono-oxígeno</i>		alcohol	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH
		éter	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	éter dietílico, antes se utilizaba como anestésico común

Continúa

TABLA 1.6 (CONTINUACIÓN)

	Estructura	Clase de compuesto	Ejemplo específico	Nombre común del ejemplo específico
2. Con dobles enlaces carbono-oxígeno*	$\begin{array}{c} \text{O} \\    \\ -\text{C}-\text{H} \end{array}$	aldehído	$\text{CH}_2=\text{O}$	formaldehído, utilizado para conservar especímenes biológicos
	$\begin{array}{c} \text{O} \\    \\ -\text{C}-\text{C}-\text{C}- \\   \quad   \quad   \end{array}$	cetona	$\begin{array}{c} \text{O} \\    \\ \text{CH}_3\text{CCH}_3 \end{array}$	acetona, disolvente para barnices y pegamentos plásticos
3. Con enlaces doble y sencillo carbono-oxígeno	$\begin{array}{c} \text{O} \\    \\ -\text{C}-\text{OH} \end{array}$	ácido carboxílico	$\begin{array}{c} \text{O} \\    \\ \text{CH}_3\text{C}-\text{OH} \end{array}$	ácido acético, componente del vinagre
	$\begin{array}{c} \text{O} \\    \\ -\text{C}-\text{O}-\text{C}- \\   \quad   \end{array}$	éster	$\begin{array}{c} \text{O} \\    \\ \text{CH}_3\text{C}-\text{OCH}_2\text{CH}_3 \end{array}$	acetato de etilo, disolvente para esmalte de uñas y para el pegamento que se utiliza en aeromodelismo
C. Grupos funcionales con nitrógeno**	$\begin{array}{c}   \\ -\text{C}-\text{NH}_2 \\   \end{array}$	amina primaria	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2$	etilamina, huele como el amoníaco
	$-\text{C}\equiv\text{N}$	nitrilo	$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{C}\equiv\text{N}$	acrilonitrilo, materia prima para la manufactura del orlón
D. Grupos funcionales con oxígeno y nitrógeno	$\begin{array}{c} \text{O} \\    \\ -\text{C}-\text{NH}_2 \end{array}$	amida primaria	$\text{H}-\text{C}-\text{NH}_2$	formamida, un ablandador para el papel
E. Grupos funcionales con halógeno	$-\text{X}$	Haluros de alquilo o arilo	$\text{CH}_3\text{Cl}$	cloruro de metilo, refrigerante local y anestésico
F. Grupos funcionales con azufre†	$\begin{array}{c}   \\ -\text{C}-\text{SH} \\   \end{array}$	tíol (también llamado mercaptano)	$\text{CH}_3\text{SH}$	metanotíol, tiene olor a col podrida
	$\begin{array}{c}   \quad   \\ -\text{C}-\text{S}-\text{C}- \\   \quad   \end{array}$	tioéter (también llamado sulfuro)	$(\text{CH}_2=\text{CHCH}_2)_2\text{S}$	sulfuro de dialilo, tiene olor a ajo

\*El grupo  $\begin{array}{c} \diagup \\ \text{C}=\text{O} \\ \diagdown \end{array}$ , presente en varios grupos funcionales, recibe el nombre de **grupo carbonilo**. El grupo  $\begin{array}{c} \text{O} \\ || \\ -\text{C}-\text{OH} \end{array}$  de los ácidos se llama **grupo carboxilo** (una contracción de *carbonilo* e *hidroxilo*).

\*\*El grupo  $-\text{NH}_2$  se llama **grupo amino**.

†Los tioles y los tioéteres son los análogos sulfurados de los alcoholes y los éteres.

## PROBLEMAS ADICIONALES

### Valencia, enlace y estructuras de Lewis

- 1.31** Muestre el número de electrones de valencia en cada uno de los siguientes átomos. Utilice el símbolo del elemento para representar su esqueleto (kernel) y utilice puntos para los electrones de valencia.
- |                   |                    |                    |
|-------------------|--------------------|--------------------|
| <b>a.</b> calcio. | <b>b.</b> oxígeno. | <b>c.</b> carbono. |
| <b>d.</b> boro.   | <b>e.</b> fósforo. | <b>f.</b> bromo.   |
- 1.32** Clasifique las siguientes sustancias como iónicas o covalentes, según las posiciones relativas de los elementos en la tabla periódica (Tabla 1.3 o cubierta interior trasera):
- |                               |                               |   |
|-------------------------------|-------------------------------|---|
| <b>a.</b> F <sub>2</sub> .    | <b>b.</b> KI.                 | <b>c.</b> P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> . |
| <b>d.</b> SiCl <sub>4</sub> . | <b>e.</b> BaCl <sub>2</sub> . | <b>f.</b> PCl <sub>3</sub> .              |
| <b>g.</b> LiBr.               | <b>h.</b> ClF.                |   |
- 1.33** Cuando se trata una solución acuosa de sal (cloruro de sodio) con una solución de nitrato de plata, se forma inmediatamente un precipitado blanco. Cuando el tetraclorometano se agita con una disolución acuosa de nitrato de plata, no se produce ningún precipitado. Explique estos hechos en función del tipo de enlaces presente en los dos cloruros.
- 1.34** Determine, para cada uno de los siguientes elementos, (1) cuántos electrones de valencia tiene y (2) cuál es su valencia principal:
- |              |              |               |
|--------------|--------------|---------------|
| <b>a.</b> O. | <b>b.</b> H. | <b>c.</b> S.  |
| <b>d.</b> C. | <b>e.</b> N. | <b>f.</b> Cl. |
- 1.35** Escriba una fórmula estructural para cada uno de los compuestos siguientes, utilizando líneas para representar cada enlace sencillo y puntos para los pares electrónicos no compartidos:
- |   |   |   |
|---|---|---|
| <b>a.</b> CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH. | <b>b.</b> CH <sub>3</sub> F.                | <b>c.</b> C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> . |
| <b>d.</b> CH <sub>3</sub> NH <sub>2</sub> .   | <b>e.</b> C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> Cl. | <b>f.</b> CH <sub>2</sub> O.              |
- 1.36** Dibuje una fórmula estructural para cada una de las moléculas covalentes siguientes. ¿Qué enlaces son polares? Indique la polaridad colocando adecuadamente los símbolos δ<sup>+</sup> y δ<sup>-</sup>.
- |                             |                               |                             |
|-----------------------------|-------------------------------|-----------------------------|
| <b>a.</b> HBr.              | <b>b.</b> CH <sub>3</sub> F.  | <b>c.</b> CO <sub>2</sub> . |
| <b>d.</b> Cl <sub>2</sub> . | <b>e.</b> SF <sub>6</sub> .   | <b>f.</b> CH <sub>4</sub> . |
| <b>g.</b> SO <sub>2</sub> . | <b>h.</b> CH <sub>3</sub> OH. |                             |
- 1.37** Considere el enlace X—H, en el cual X es un átomo distinto al H. El H en un enlace polar es más ácido (se arranca más fácilmente) que el H en un enlace no polar. Considerando la polaridad del enlace, ¿qué hidrógeno del ácido acético, CH<sub>3</sub>C(=O)—OH, será el más ácido? Escriba una ecuación para la reacción entre el ácido acético y el hidróxido sódico.

### Isómeros Estructurales

- 1.38** Dibuje las fórmulas estructurales para todos los isómeros posibles que tengan cada una de las fórmulas moleculares siguientes:
- |   |  |   |
|---|--|---|
| <b>a.</b> C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> .   | <b>b.</b> C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> Cl.              | <b>c.</b> C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> F <sub>2</sub> .  |
| <b>d.</b> C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> .   | <b>e.</b> C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> F.               | <b>f.</b> C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> Cl <sub>2</sub> . |
| <b>g.</b> C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O. | <b>h.</b> C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> I <sub>2</sub> . |   |
- 1.39** Dibuje las fórmulas estructurales de los cinco isómeros del C<sub>6</sub>H<sub>14</sub>. Trate de ser sistemático al dibujarlas, comenzando por una cadena consecutiva de seis átomos de carbono.

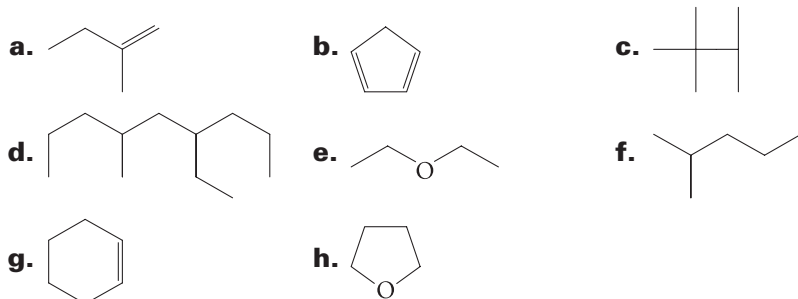


## Fórmulas estructurales

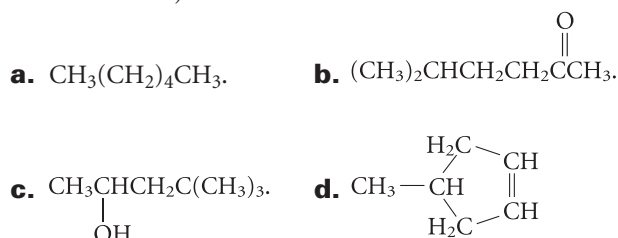
**1.40** Escriba una fórmula estructural que muestre todos los enlaces, para cada una de las siguientes fórmulas estructurales abreviadas:

- a.**  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$ .      **b.**  $(\text{CH}_3)_3\text{CCH}_2\text{CH}_3$ .      **c.**  $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ .  
**d.**  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SCH}_3$ .      **e.**  $\text{CH}_2\text{ClCH}_2\text{OH}$ .      **f.**  $(\text{CH}_3\text{CH}_2)_2\text{NH}$ .

**1.41** Escriba las fórmulas estructurales que corresponden a las siguientes estructuras abreviadas, y muestre el número correcto de hidrógenos sobre cada carbono:



**1.42** Para cada una de las siguientes fórmulas estructurales abreviadas, escriba una fórmula de esqueleto (como en el Problema 1.41).



**1.43** En la Figura 1.12 se muestra una fórmula abreviada de la 2-heptanona.

- a.** ¿Cuántos carbonos tiene la 2-heptanona?  
**b.** ¿Cuál es su fórmula molecular?  
**c.** Escriba una fórmula estructural más detallada.

**1.44** ¿Cuál es la *fórmula molecular* para cada uno de los compuestos siguientes? Consulte las figuras 1.13 y 1.14 para las fórmulas estructurales abreviadas.

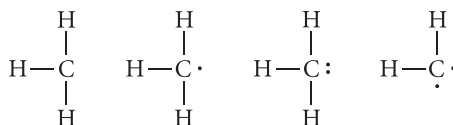
- a.** benceno.      **b.** testosterona.      **c.** limoneno.  
**d.** penicilina-G.      **e.** cumarina.      **f.** nicotina.

## Carga formal, resonancia, y formalismo de las flechas curvas

**1.45** Escriba las fórmulas de punto-electrón para las siguientes especies. Muestre donde están localizadas las cargas formales, en caso de que las haya.

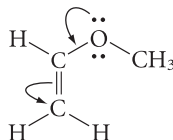
- a.** ácido nitroso,  $\text{HONO}$ .      **b.** ácido nítrico,  $\text{HONO}_2$ .  
**c.** formaldehído,  $\text{H}_2\text{CO}$ .      **d.** ion amonio,  $\text{NH}_4^+$ .  
**e.** ion cianuro,  $\text{CN}^-$ .      **f.** monóxido de carbono,  $\text{CO}$ .  
**g.** tricloruro de boro,  $\text{BCl}_3$ .      **h.** peróxido de hidrógeno,  $\text{H}_2\text{O}_2$ .  
**i.** ion bicarbonato,  $\text{HCO}_3^{2-}$ .

**1.46** Analice cada una de las siguientes especies carbonadas, altamente reactivas. ¿Cuál es la carga formal del carbono en cada especie?



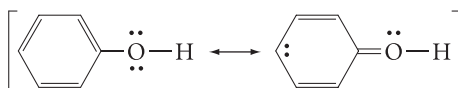
**1.47** Dibuje las fórmulas de punto-electrón para las dos estructuras contribuyentes al híbrido de resonancia del ion nitrito,  $\text{NO}_2^-$ . (Cada oxígeno está unido al nitrógeno). ¿Cuál es la carga sobre cada oxígeno en cada contribuyente y en la estructura híbrida? Utilice flechas curvas para mostrar el movimiento de los pares de electrones que interconvierten las dos estructuras.

**1.48** Escriba la estructura que se obtiene cuando se mueven los electrones como lo indican las flechas curvas en la estructura siguiente:

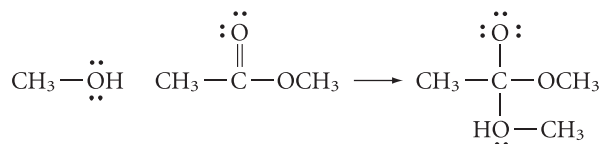


En la estructura resultante, ¿alcanza cada átomo una capa de valencia de electrones completa? Localice las cargas formales en cada estructura.

**1.49** En las estructuras siguientes, dibuje flechas curvas que muestren el movimiento de los pares electrónicos para interconvertir las estructuras, y localice cualquier carga formal.



**1.50** Dibuje flechas curvas que muestren el movimiento de los electrones para formar el producto a partir de los reactivos en la ecuación siguiente, y localice cualquier carga formal.



### Estructura electrónica y geometría molecular

**1.51** Complete las fórmulas siguientes con pares electrónicos no compartidos donde falten:

a.  $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$ .

c.  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SH}$ .

b.  $\text{CH}_3\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{OH}$

d.  $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ .

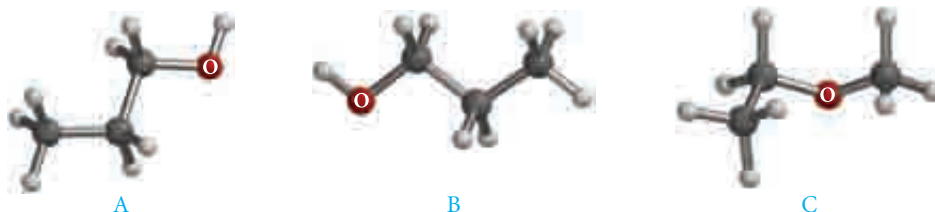
**1.52** Realice un dibujo (similar al de la parte derecha de la Figura 1.6) de la distribución electrónica esperada para los átomos de nitrógeno si sus orbitales  $s$  y  $p$  sufren hibridación  $sp^3$ . Basándose en este modelo, prediga la geometría de la molécula de amoníaco,  $\text{NH}_3$ .

**1.53** El ion amonio,  $\text{NH}_4^+$ , tiene geometría tetraédrica similar a la del metano. Explique esta estructura en función de los orbitales atómicos y moleculares.

**1.54** Mediante el empleo de líneas, cuñas punteadas y cuñas sólidas muestre la geometría del  $\text{CCl}_4$  y  $\text{CH}_3\text{OH}$ .

**1.55** El silicio se encuentra justo debajo del carbono en la tabla periódica. Prediga la geometría del tetracloruro de silicio,  $\text{SiCl}_4$ .

**1.56** Examine los tres modelos de bolas y varillas que se muestran a continuación:



a. Dibuje las tres estructuras utilizando líneas, cuñas punteadas y cuñas sólidas (véase Figura 1.11).

b. ¿Qué relación existe entre las estructuras A y B, son idénticas o son isómeros? ¿Y entre las estructuras A y C?

## Clasificación de compuestos orgánicos

**1.57** Escriba una fórmula estructural que corresponda a la fórmula molecular  $C_4H_8O$  y sea

- a.** acíclica.                      **b.** carbocíclica.                      **c.** heterocíclica.

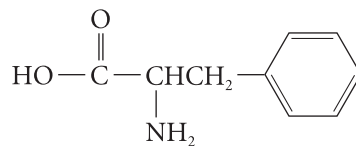
**1.58** Clasifique los compuestos siguientes en grupos que tengan comportamiento químico similar:

- a.**  $C_5H_{12}$ .                      **b.**  $CH_3NH_2$ .                      **c.**  $C_4H_9OH$ .  
**d.**  $CH_3OCH_3$ .                      **e.**  $HOCH_2CH_2OH$ .                      **f.**  $C_8H_{18}$ .  
**g.**  $H_2NCH_2CH_2NH_2$ .                      **h.**  $CH_3OH$ .                      **i.**  $(CH_3)_2CHNH_2$ .  
**j.**  $C_3H_7OH$ .                      **k.**  $CH_3CH_2CH_3$ .                      **l.**  $C_6H_{14}$ .

**1.59** Con la ayuda de la Tabla 1.6, escriba una fórmula estructural para cada uno de los siguientes casos:

- a.** un alcohol,  $C_4H_{10}O$ .                      **b.** un éter,  $C_3H_8O$ .  
**c.** un aldehído,  $C_3H_6O$ .                      **d.** una cetona,  $C_4H_8O$ .  
**e.** un ácido carboxílico,  $C_3H_6O_2$ .                      **f.** un éster,  $C_5H_{10}O_2$ .

**1.60** Muchos compuestos orgánicos contienen más de un grupo funcional. Un ejemplo de ello es la fenilalanina (mostrada abajo), uno de los componentes básicos más simples de las proteínas (Capítulo 17).



fenilalanina

- a.** ¿Qué grupos funcionales están presentes en la fenilalanina?  
**b.** Reescriba la estructura, agregando todos los pares de electrones no compartidos.  
**c.** ¿Cuál es la fórmula molecular de la fenilalanina?  
**d.** Dibuje otro isómero estructural que tenga la misma fórmula. ¿Qué grupos funcionales tiene este isómero?