

TEMA 1

CONCEPTOS FUNDAMENTALES

EN QUIMICA ORGANICA

1. Concepto y origen de la Química Orgánica.
2. La Industria Química Orgánica.
3. Representación de Lewis de las moléculas orgánicas.
4. Electronegatividad y polarización del enlace.
5. Carga formal.

TEMA 1. CONCEPTOS FUNDAMENTALES EN QUIMICA ORGANICA

1. Concepto y origen de la Química Orgánica. 2. La Industria Química Orgánica. 3. Representación de Lewis de las moléculas orgánicas. 4. Electronegatividad y polarización del enlace. 5. Carga formal.

1. Concepto y origen de la Química Orgánica.

¿Qué es la Química Orgánica? La Química Orgánica se ocupa del estudio de las propiedades y transformaciones de los compuestos que contienen el elemento carbono. El elevado número y complejidad de estos compuestos se deben a las características de enlazamiento del carbono, que puede formar enlaces hasta con cuatro átomos más. Además, este elemento se puede unir a otros átomos de carbono para constituir largas cadenas compuestas por cientos e incluso miles de átomos. El carbono puede formar enlaces estables con muchos átomos distintos de la tabla periódica y además, puede formar diferentes tipos de enlaces: simples, dobles o triples. La diversidad de la química que tiene como base el carbono no es sorprendente si se piensa en las diferencias que presentan las formas del carbono elemental: diamante, grafito y fullerenos. El diamante es duro e incoloro, el grafito es suave y negro y los fullerenos son de color azul oscuro. Estas diferencias en las propiedades de las distintas formas del carbono son consecuencia de las diferencias estructurales que presentan dichas formas.

El aspecto más interesante de la Química Orgánica es que es la química de la vida. De hecho, el nombre mismo refleja la antigua creencia de que ciertas sustancias sólo podían ser producidas por organismos vivos. Los químicos saben ahora que lo que estas sustancias producen tiene en común que todas ellas contienen el carbono.

2. La Industria Química Orgánica.

Uno de los sectores industriales de crecimiento más rápido en una economía desarrollada es la industria química y, dentro de ésta, destaca la industria Química Orgánica (IQO). La característica más llamativa de la Industria Química Orgánica (IQO) es su gran diversidad. Esta diversidad se debe a varios aspectos, entre los que destacan:

- ✚ El tipo y finalidad de sus productos: desde abonos hasta perfumes.
- ✚ A la capacidad de producción: desde millones de toneladas de etileno hasta pocas decenas de kilogramos de algunos medicamentos.
- ✚ A la extensa variedad de estructuras químicas que se sintetizan industrialmente.

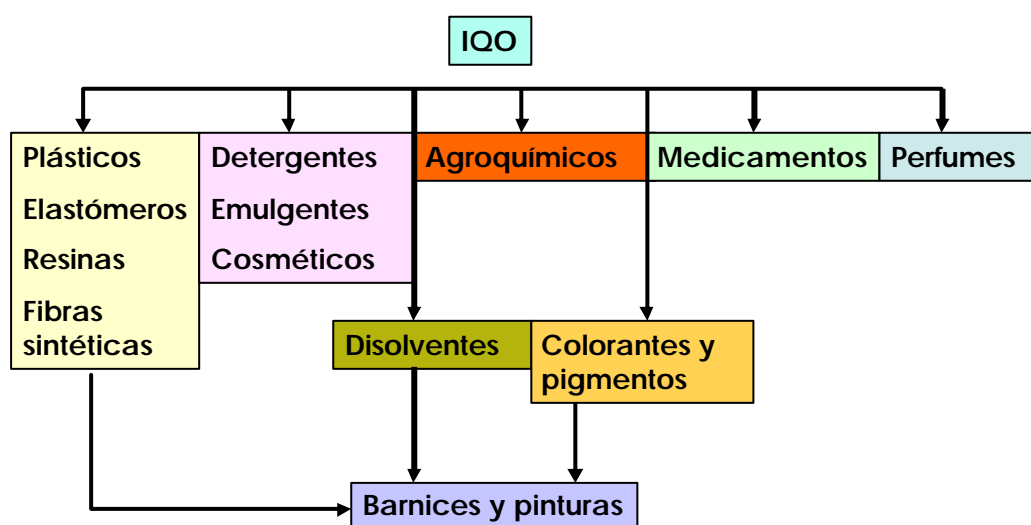
- ✚ A los procesos de síntesis desarrollados para fabricar dichas estructuras químicas.

Toda la IQO se alimenta de las industrias químicas pesadas cuyas materias primas son el petróleo, el gas natural y el carbón, mientras que los productos de estas empresas son, a su vez, las materias primas de los grandes sectores, tal y como se verá más adelante. Otra gran parte de la IQO se abastece de productos naturales de origen animal o vegetal.

Los productos obtenidos en la IQO se utilizan bien como intermedios para otros procesos industriales o bien para consumo directo (medicamentos, plásticos...). Estos últimos, es decir, los productos orgánicos industriales utilizados para consumo directo pueden englobarse en dos grandes grupos:

- ✚ Aquellos que se producen a gran escala, toneladas por año, y su precio por kilogramo es moderado. Como son los plásticos, abonos, detergentes, plaguicidas...
- ✚ Aquellos que se fabrican en cantidades pequeñas, pero su precio es muy alto y, por tanto, el volumen de sus ventas, en dinero, también lo es. La fabricación de estos productos constituye la llamada **Industria Química Orgánica fina**. La IQO fina en la actualidad es la IQO que posee mayor competencia, mayor gasto en investigación y mayor velocidad de cambio.

A continuación se muestra un esquema de los distintos sectores de la IQO:



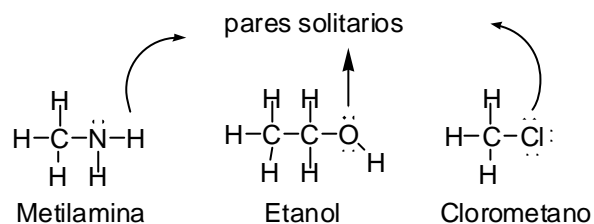
_____ volumen de producción _____
 _____ precio _____

3. Representación de Lewis de las moléculas orgánicas.

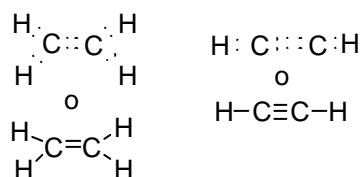
Según Lewis una capa llena de electrones es especialmente estable y los átomos transfieren o comparten electrones para tratar de alcanzar una capa llena de electrones y alcanzar así la estructura electrónica estable similar a la del gas noble más próximo, que normalmente contiene 8 electrones en su capa más externa. La tendencia de los átomos a adquirir la configuración electrónica externa de 8 electrones se la conoce como **regla del octeto**.

Cuando dos átomos comparten dos electrones entre sí se forma entre ellos un **enlace covalente**. Los átomos de acuerdo con su configuración electrónica pueden cumplir la regla del octeto con pares de electrones compartidos (electrones enlazantes) y pares de electrones sin compartir (electrones no enlazantes). E

Las estructuras de Lewis utilizan un punto para representa a un electrón de valencia, y un par de puntos o una línea para representar a pares de electrones. A continuación, se indica la representación de Lewis de algunas moléculas orgánicas, como el etano, la metilamina, el metanol y el clorometano. Nótese que estas tres últimas contienen átomos que consiguen su octeto electrónico mediante la suma de electrones enlazantes y no enlazantes, como el caso del átomo nitrógeno de la metilamina, del átomo de oxígeno del metanol, o del átomo de cloro del clorometano.

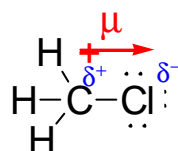


Enlaces múltiples. Como se acaba de ver, cuando se comparte un par de electrones entre dos átomos se forma un enlace simple. Muchas moléculas orgánicas contienen átomos que comparten dos pares electrónicos, como la del etileno, y se dice que estos átomos están unidos mediante un **enlace doble**. También hay estructuras orgánicas con átomos que comparten tres pares de electrones, como los de la molécula de acetileno, y en este caso se dice que el enlace entre los átomos es un **triple enlace**.



4. Electronegatividad y polarización del enlace.

Cuando dos átomos comparten por igual los dos electrones del enlace covalente se dice que el enlace es **no polar**, como el enlace de la molécula de hidrógeno o el enlace carbono-carbono del etano. La mayor parte de los enlaces covalentes están formados por dos átomos diferentes, de manera que los electrones del enlace son atraídos con mayor intensidad por uno de los dos átomos que forman el enlace. Cuando esto ocurre el enlace covalente se denomina **enlace polar**. Por ejemplo, cuando el carbono se enlaza al cloro el par de electrones del enlace se encuentra atraído con más intensidad por el átomo de cloro, de manera que sobre el átomo de carbono aparece una pequeña carga parcial positiva y sobre el átomo de cloro aparece una cantidad igual de carga negativa. En la siguiente figura se indica el enlace covalente polar C-Cl de la molécula de clorometano. La polaridad del enlace se indica con una flecha que dirige su punta hacia el extremo negativo del enlace polar y un signo más en el extremo positivo del enlace.



Clorometano

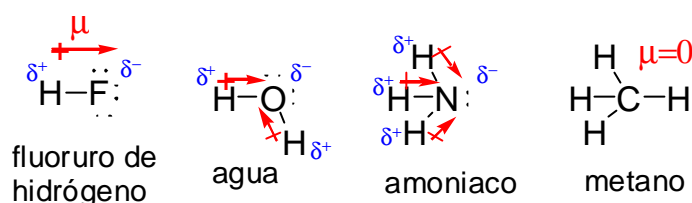
La polaridad del enlace se mide mediante su **momento dipolar** (μ) que se define como la cantidad de diferencia de carga multiplicada por la longitud del enlace. El símbolo δ^+ quiere decir una pequeña cantidad de carga positiva y el símbolo δ^- quiere decir una pequeña cantidad de carga negativa.

A fin de predecir si un enlace covalente va a ser polar se recurre a la comparación de las electronegatividades de los átomos que forman el enlace. La **electronegatividad** se define como la tendencia del núcleo atómico a la atracción de electrones.

Pauling desarrolló una escala de electronegatividades relativas para la mayoría de los átomos. En el Sistema Periódico la electronegatividad aumenta de izquierda a derecha y disminuye al bajar en una columna, por lo que el flúor es el elemento más electronegativo. A continuación, se da una tabla de electronegatividades para los principales átomos de interés en Química Orgánica.

H 2.2							
Li 1.0	Be 1.6	B 1.8	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	
						Br 3.0	
						I 2.7	

En un enlace covalente el átomo con mayor electronegatividad es el extremo negativo del dipolo, tal y como se indica en las siguientes estructuras.



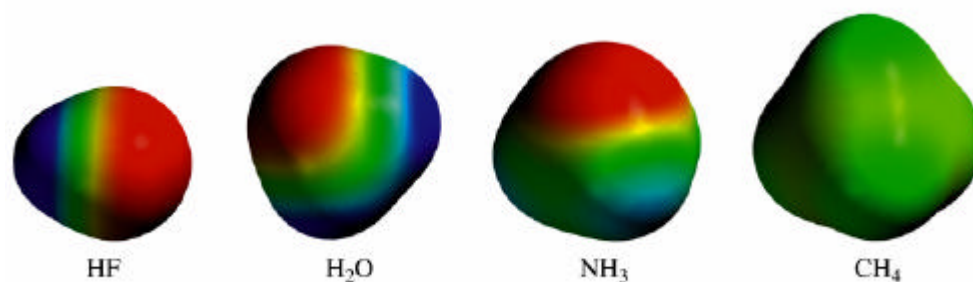
A lo largo de todos los temas que se van a desarrollar durante este curso irán apareciendo figuras que representan el contorno de potencial electrostático. Estas figuras muestran la distribución de la densidad de carga en la molécula así como la forma que deben tener las moléculas atendiendo a las nubes de carga existentes. En estas figuras muestran la asimetría en la distribución de carga a lo largo de un enlace de manera que el color del contorno del potencial electrostático varía de color según su valor sea más negativo (densidad de carga elevada debido a átomos electronegativos) o su valor sea más positivo (déficit de carga debido a la presencia de átomos poco electronegativos). En la siguiente figura se muestra esta variación del color respecto al signo del potencial:

rojo < naranja < amarillo < verde < azul

potencial electrostático
más negativo

potencial electrostático
más positivo

En la siguiente figura se muestran los contornos de potencial electrostático que presentan las moléculas descritas anteriormente:



Como se observa en el caso del fluoruro de hidrógeno el átomo de flúor es mucho más electronegativo que el hidrógeno, por tanto, la densidad de carga a lo largo del enlace entre el flúor y el hidrógeno está desplazada hacia el flúor creando un potencial electrostático negativo alrededor de dicho átomo (color rojo) y un potencial electrostático positivo alrededor del hidrógeno (color azul) que muestra el déficit de carga negativa sobre dicho átomo. Lo mismo ocurre en el caso de la molécula de agua, en este caso el oxígeno es más electronegativo que el hidrógeno y los dos enlaces H-O son polares. El momento dipolar de los dos enlaces H-O del agua apunta hacia el oxígeno por lo que alrededor de dicho átomo se crea un potencial electrostático negativo (rojo), mientras que sobre los dos átomos de hidrógeno aparece un déficit de carga negativa (azul). El caso del amoníaco es similar al de la molécula de agua: el nitrógeno es más electronegativo que el hidrógeno por tanto los tres enlaces NH son polares. La densidad de carga se halla desplazada hacia el nitrógeno lo cual se ve perfectamente en el diagrama de contorno de potencial por la aparición de una zona de color rojo en la parte superior de la figura (posición del nitrógeno) y la aparición de una zona de color azul en la parte inferior donde se encuentran los tres átomos de hidrógeno. Por último, en el caso del metano, en el que no existen enlaces polares debido a la similar electronegatividad del átomo de carbono y el de hidrógeno, hay una distribución simétrica de la densidad de carga lo que conlleva la aparición de un potencial electrostático más bien neutro (verde) alrededor de todos los átomos de la molécula.

5. Carga formal.

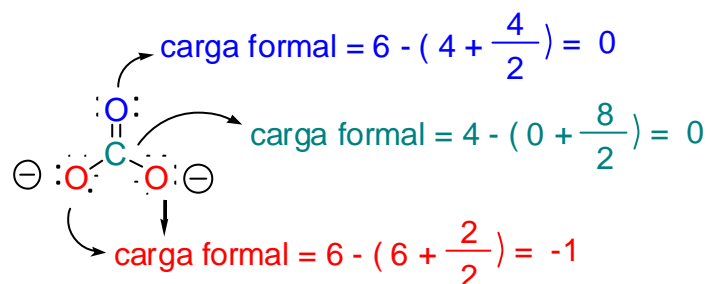
En los enlaces polares las cargas parciales sobre los átomos son reales. Sin embargo, cuando se dibujan determinadas estructuras químicas según la representación de Lewis aparecen cargas eléctricas asociadas a determinados átomos, denominadas **cargas formales**. Las cargas formales son un método de seguir la pista de los electrones, pero pueden o no corresponder a cargas reales. Las cargas formales sobre los átomos se calculan según la siguiente ecuación:

$$\text{Carga formal} = n^{\circ} \text{ electrones capa de valencia} - \left(n^{\circ} \text{ electrones no compartidos} + \frac{n^{\circ} \text{ electrones enlazantes}}{2} \right)$$

A continuación, aparecen indicadas las estructuras de Lewis del anión carbonato y del nitrometano. Se puede apreciar que sobre dos de los átomos de oxígeno del anión carbonato aparecen una carga formal negativa y en la molécula de nitrometano aparece una carga formal positiva sobre el átomo de nitrógeno y una carga parcial negativa sobre uno de los dos átomos de oxígeno.

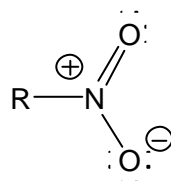


En la siguiente figura se indica el cálculo de la carga formal de cada uno de los átomos que integran el anión carbonato:

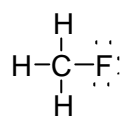


Algunas moléculas orgánicas, aunque eléctricamente neutras, están compuestas en realidad por átomos con cargas formales neutralizadas entre sí.

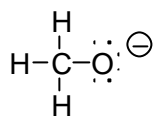
Por ejemplo, el grupo nitro:



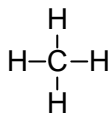
Cuando átomos diferentes poseen la misma configuración electrónica en la capa de valencia, aunque posean distinta carga formal, se denominan átomos isoelectrónicos. Por ejemplo, el átomo de fluor del fluorometano y el átomo de oxígeno del anión metóxido de oxígeno son átomos isoelectrónicos al igual que el átomo de carbono del metano y el átomo de nitrógeno del catión amonio, que también son átomos isoelectrónicos.



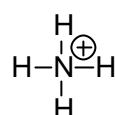
Fluorometano



Anión metóxido



Metano



Cati3n amonio