

INTRODUCCION A LA QUIMICA ORGANICA

- 1. Concepto y origen de la Química Orgánica.
- 2. Evolución histórica de la 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.

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 debe 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 dar lugar a largas cadenas constituidas 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 y grafito. El diamante es duro e incoloro mientras que el grafito es suave y negro. Estas diferencias en las propiedades de las distintas formas del

carbono son consecuencia de las diferencias estructurales que presentan dichas formas.

La Química Orgánica, junto con la Bioquímica, es la ciencia básica que permite explicar los procesos químicos que tienen lugar en los organismos vivos. De hecho, el nombre Química Orgánica proviene de la antigua creencia de que ciertas sustancias sólo podían ser producidas por organismos vivos.

2. Evolución histórica de la Química Orgánica.

Los pueblos prehistóricos hicieron uso de las propiedades de algunos compuestos orgánicos y realizaron algunas reacciones químico-orgánicas. Los antiguos egipcios, los romanos y los fenicios emplearon varios colorantes que eran verdaderos compuestos químicos puros: el índigo, la alizarina y la legendaria púrpura de Tiro. Los dos primeros colorantes se aislaron

de las plantas y el último se obtuvo en pequeñas cantidades a partir de una especie rara de molusco.

Desde muy antiguo se sabía que la grasa animal se podía convertir en jabón por tratamiento con lejía. Hasta época tan reciente como 1948, los químicos orgánicos no pudieron sintetizar productos que fueran capaces de competir con el jabón (detergentes).

La fermentación del almidón y de los azúcares para obtener alcohol se conoce desde tiempos prehistóricos y el método que se aplica en la actualidad no difiere mucho del que se ideó hace cientos de años.

La Química Orgánica, tal y como hoy la conocemos, arranca de finales del siglo XVIII cuando se inició el aislamiento de sustancias orgánicas de extractos de origen natural. En este orden de cosas son dignos de mención los estudios que el alemán Carl Scheele llevó a cabo entre los años 1769 a 1786 sobre aislamiento de diversos compuestos orgánicos de fuentes naturales.

En 1784, Lavoisier ideó un método, basado en la combustión de la materia orgánica, que permitía determinar los porcentajes de carbono, hidrógeno, oxígeno y nitrógeno que constituían los compuestos orgánicos.

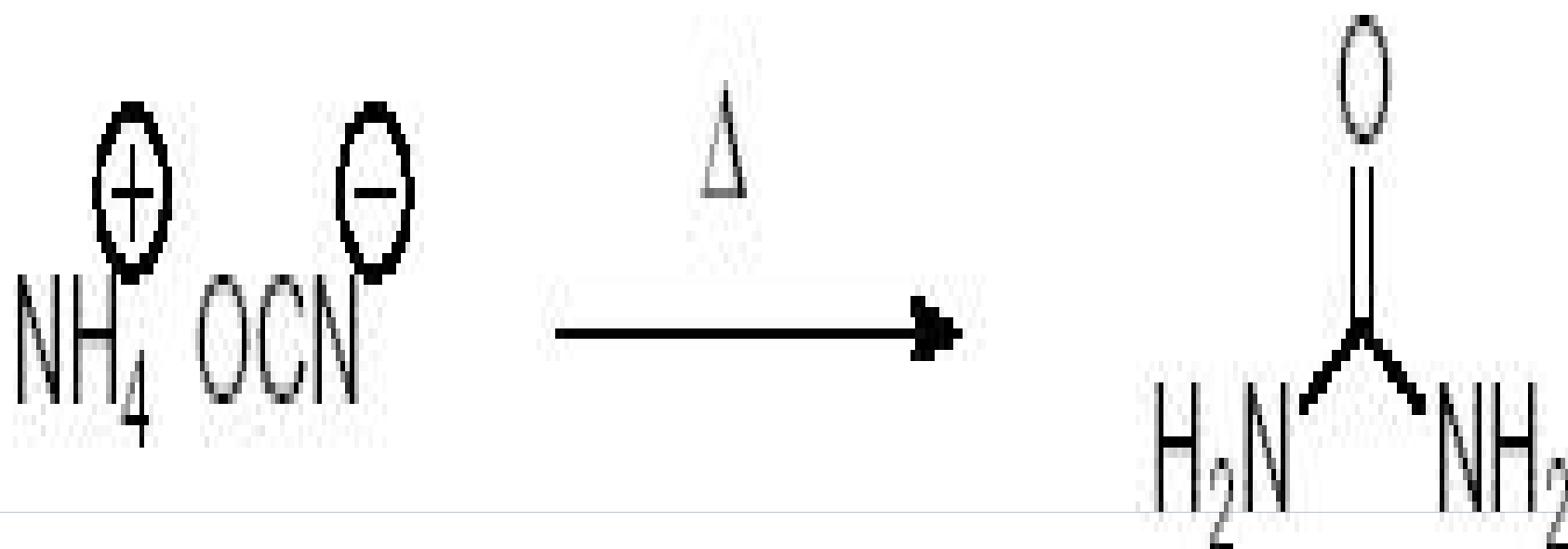
En 1807, el químico sueco Berzelius denominó, con el nombre de compuestos orgánicos, a aquellos compuestos derivados de los seres vivos o de la materia viva. Durante todo el siglo XIX, Berzelius y otros químicos creyeron que tales compuestos

poseían una fuerza vital y que, por tanto, sería imposible sintetizar un compuesto orgánico a partir de materiales inorgánicos. La teoría de la fuerza vital fue declinando a medida que la aportación creciente de datos analíticos evidenciaba que las leyes químicas que gobernaban el comportamiento de la materia inorgánica eran también válidas para los compuestos orgánicos.

La teoría de la fuerza vital fue declinando a medida que la aportación creciente de datos analíticos evidenciaba que las leyes químicas que gobernaban el comportamiento de la materia inorgánica eran también válidas para los compuestos orgánicos.

La teoría de la fuerza vital sufrió un gran revés en 1828, año en el que Wöhler consiguió sintetizar la urea por descomposición térmica del isocianato amónico. Según la clasificación de Berzelius la urea era un compuesto orgánico, poseedor

la urea era un compuesto orgánico, poseedor de fuerza vital y, por tanto, imposible de ser sintetizado a partir de compuestos clasificados como inorgánicos:



isocianato amónico

urea

<http://es.geocities.com/quimicorganica/>

La síntesis de la urea obligó a un replanteamiento de la definición de compuesto orgánico, pasándose a denominar como tal todo compuesto que contuviese carbono en su estructura.

Durante el primer tercio de siglo XIX investigadores como Gay-Lussac, Liebig y Berzelius descubrieron y perfeccionaron nuevos métodos analíticos que permitieron determinar la clase de elementos, así como su proporción, que constituían los compuestos orgánicos.

Hacia mitad del siglo XIX, el desarrollo incipiente de la síntesis orgánica permitió la preparación de compuestos orgánicos a partir de materiales de partida relativamente simples.

Uno de los aspectos de la Química que se resistía a los esfuerzos de las mentes más brillantes del siglo XIX era el relacionado con la estructura de los compuestos orgánicos. Se sabía, por ejemplo, que el alcohol etílico y el dimetiléter tenían la misma fórmula

moléculas, C_2H_6O , pero mientras que el primero es un líquido con punto de ebullición $78^{\circ}C$, el segundo es un gas.

Los químicos del siglo XIX pensaron que las diferentes propiedades químicas que presentaban compuestos con la misma fórmula molecular se tenían que deber a la forma en la que se ordenaban los átomos en la estructura molecular.

Teoría estructural de Kekulé: fórmulas estructurales.

En 1858 Kekulé propuso una teoría estructural que permitía asignar la estructura de los compuestos orgánicos más simples. Esta teoría se basaba en la tetravalencia del átomo de carbono y en el concepto de enlace químico, y fue la base de partida para la asignación de las estructuras de moléculas orgánicas sencillas, tales como el metano, el etano o el propano.

La teoría estructural de Kekulé permitió explicar el fenómeno de la isomería, es decir la presencia de diferentes propiedades físicas y/o químicas en compuestos con la misma fórmula molecular.

En 1916, la introducción del concepto de enlace covalente por el químico estadounidense Lewis proporcionó la base que permitió relacionar las estructuras de las moléculas orgánicas y sus propiedades químicas.

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

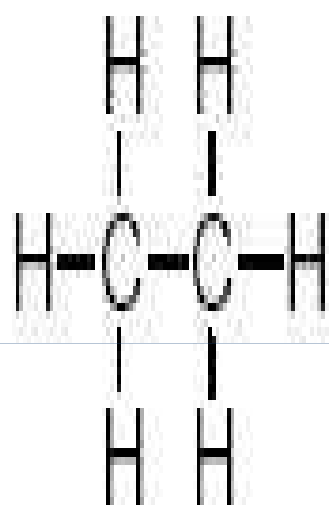
electrones en su capa más externa. La tendencia de los átomos a adquirir la configuración electrónica externa de 8 electrones se la conoce como **regla del octeto**. Cuando dos átomos comparten dos electrones entre sí se forma entre ellos un enlace covalente. Los átomos, de acuerdo con su configuración electrónica, pueden cumplir la regla del octeto con pares de electrones compartidos (electrones enlazantes) y pares de electrones sin compartir (electrones no enlazantes).

Las estructuras de Lewis utilizan un punto para representar 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,

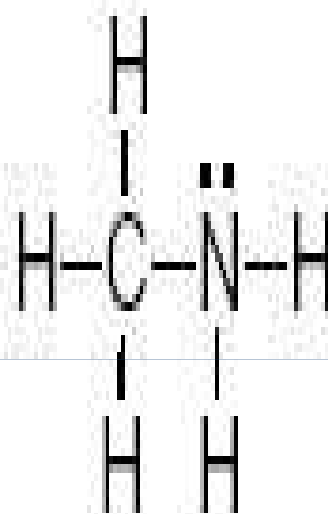
como el etano, la metilamina, el metanol y el clorometano. Nótese que estas tres últimas contienen átomos que consiguen su octeto electrónico mediante la suma de electrones enlazantes y no enlazantes, como el caso del átomo nitrógeno de la

átomo nitrógeno de la
metilamina, del átomo de oxígeno del
metanol, o del átomo de cloro del
clorometano.

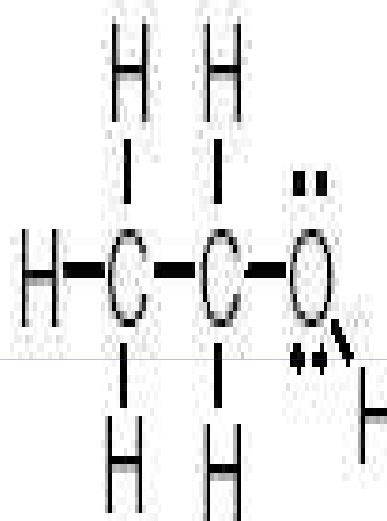
Representación de Lewis de algunos compuestos orgánicos



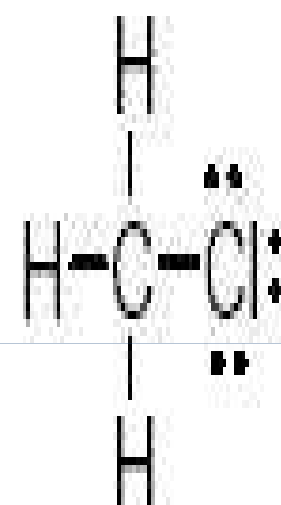
Etano



Metilamina



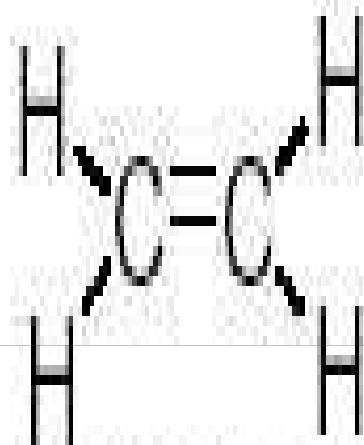
Etanol



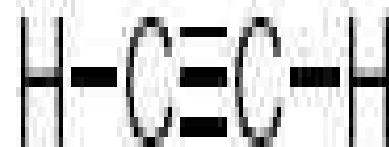
Clorometano

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.

Representación de Lewis del etileno y del acetileno



etileno



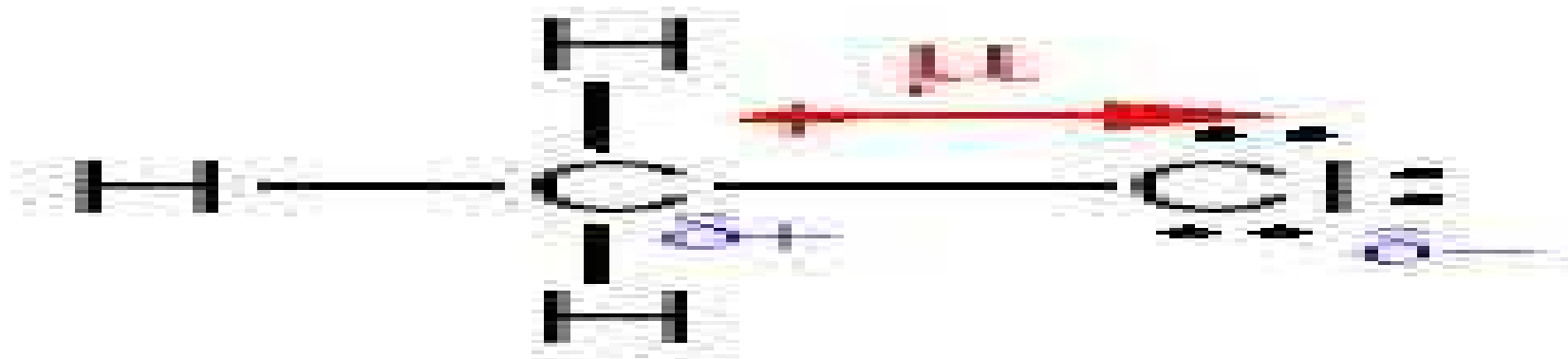
acetileno

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 ocurre en el enlace covalente de la molécula de hidrógeno, en el enlace covalente de la molécula de cloro, o en el enlace covalente carbono-carbono del etano. Sin embargo, 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 mas (+) 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

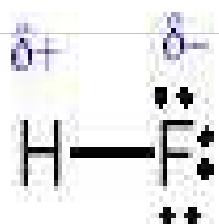
a la atracción de electrones. Pauling desarrolló una escala de electronegatividades relativas para la mayoría de los átomos. En el Sistema Periódico la electronegatividad aumenta de izquierda a derecha y disminuye al bajar en una columna, por lo que el flúor es el elemento más electronegativo. A continuación,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

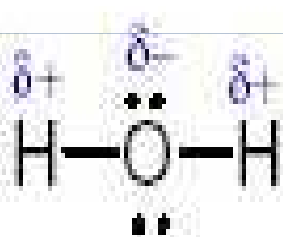
<http://es.geocities.com/quimicorganica>

Como se deduce de la tabla anterior, un enlace C-H debería estar muy poco polarizado, puesto que la electronegatividad del hidrógeno y del carbono es similar. Sin embargo, los halógenos, el oxígeno y el nitrógeno, que son heteroátomos que suelen aparecer en las estructuras orgánicas, son más electronegativos que el carbono y, por tanto, los enlaces C-halógeno, C-O y C-N son polares. A continuación, se representan las estructuras de Lewis de las moléculas de fluoruro de hidrógeno (HF), agua (H₂O) y amoníaco (NH₃) con indicación de la

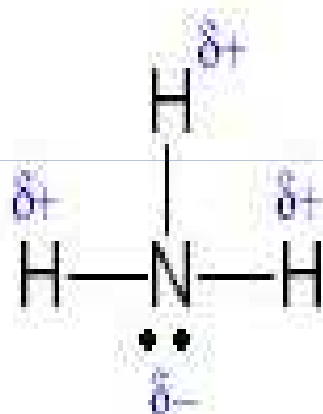
polaridad de los enlaces. La molécula de metano se puede considerar que está constituida por enlaces C-H muy poco polarizados:



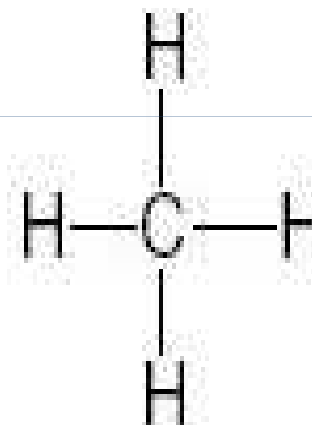
fluoruro de
hidrógeno



agua

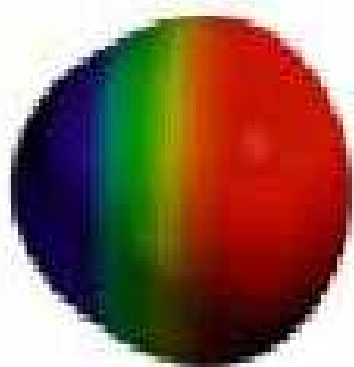


amoníaco

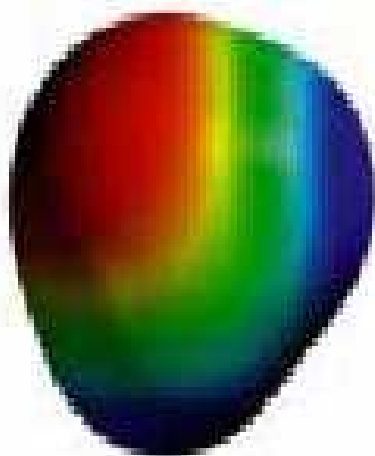


metano

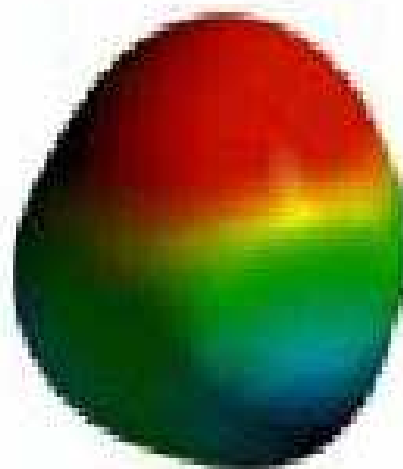
En la siguiente figura se muestran los contornos de potencial electrostático que presentan las moléculas descritas anteriormente:



HF



H₂O



NH₃



CH₄

El enlace H-F del fluoruro de hidrógeno está fuertemente polarizado y la densidad de carga a lo largo del enlace entre el flúor y el hidrógeno está desplazada hacia el átomo más electronegativo (flúor) creando un potencial electrostático negativo alrededor de dicho átomo (color rojo) y en consecuencia un potencial electrostático positivo alrededor del hidrógeno (color azul).

Lo mismo ocurre en el caso de la molécula de agua, en el que la mayor electronegatividad del oxígeno provoca la polarización de los enlaces O-H

El caso del amoníaco es similar al de la molécula de agua: el nitrógeno es más electronegativo que el hidrógeno y, por tanto, los tres enlaces N-H son polares. La densidad de carga se halla desplazada hacia el nitrógeno lo cual se ve perfectamente en el diagrama de contorno de potencial electrostático por la aparición de una zona de color rojo en

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 metano no existen enlaces polares debido a la similar electronegatividad del átomo de carbono y el de hidrógeno. La distribución simétrica de la densidad de carga conlleva la aparición de un potencial electrostático más bien neutro (verde) alrededor de todos los átomos de la molécula.

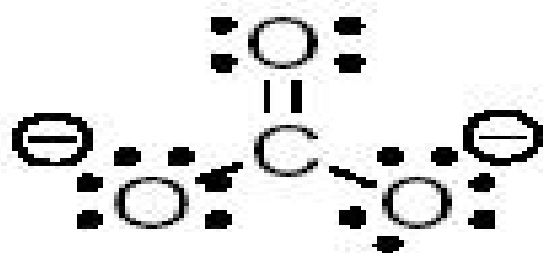
5.Carga

formal

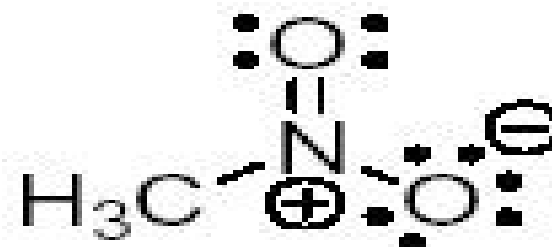
En los enlaces polares las cargas parciales sobre los átomos son reales. Sin embargo, cuando se dibujan determinadas estructuras químicas, según la representación de Lewis, aparecen cargas eléctricas asociadas a algunos átomos, denominadas cargas formales. Las cargas formales permiten contar el número de electrones de un átomo determinado de una estructura., y se calculan según la siguiente ecuación:

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

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.

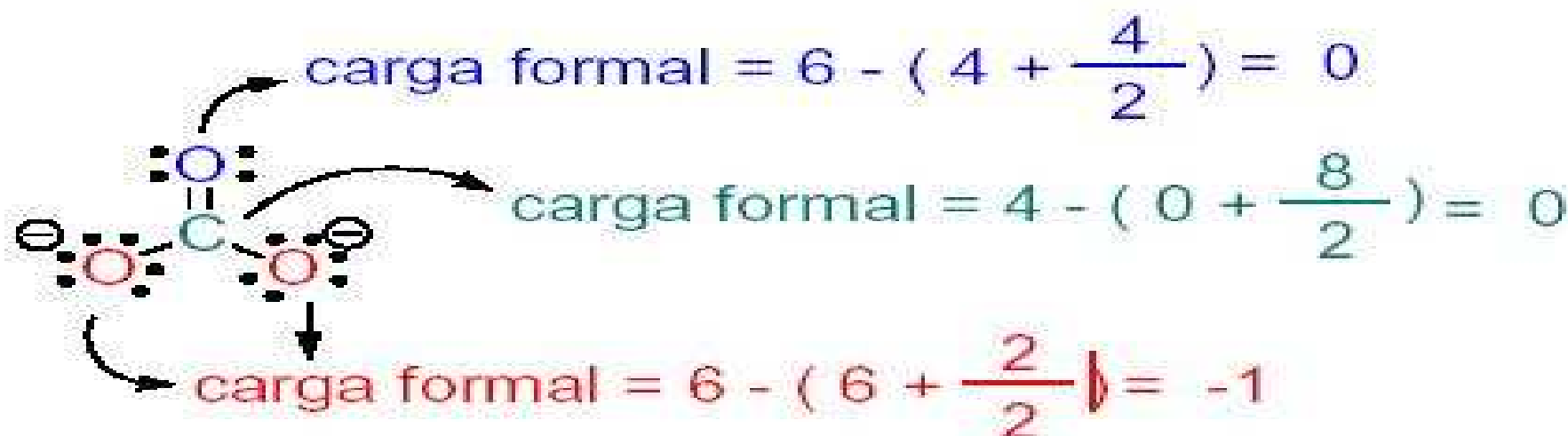


Anión carbonato

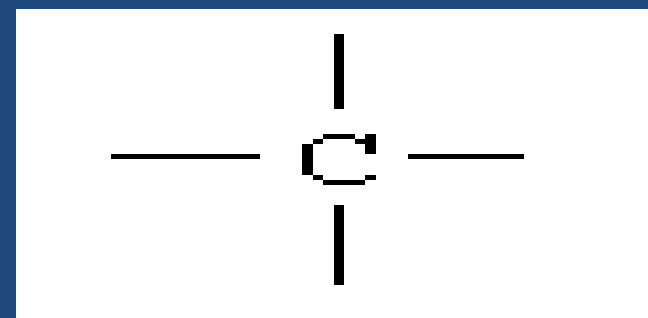
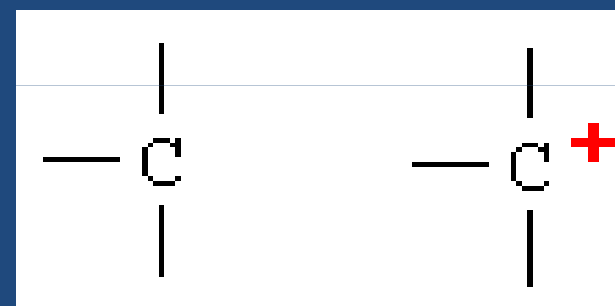
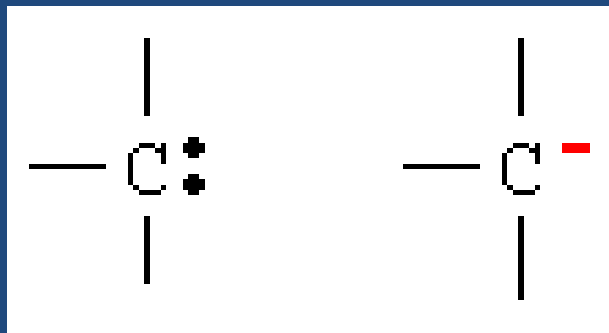


Nitrometano

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



Por ejemplo:



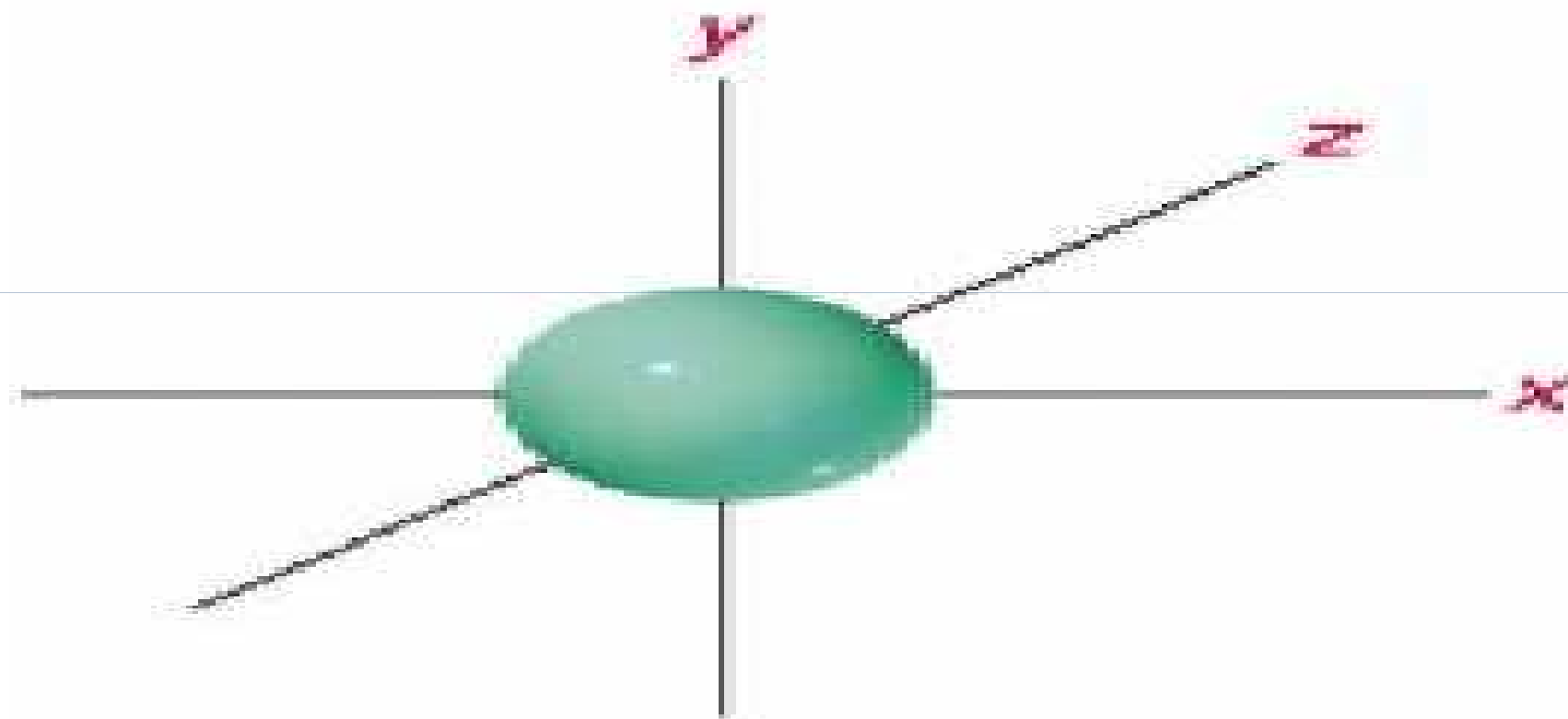
1. Orbitales atómicos.

En química general suele estudiarse detenidamente el concepto de orbital, por tanto bastará con recordar que orbital es una región tridimensional alrededor del núcleo atómico donde existe mayor probabilidad de encontrar un electrón. El principio de incertidumbre de Heisenberg indica que la posición y el momento de un electrón no pueden conocerse simultáneamente. Esto significa que nunca

podemos saber con total certeza donde se encuentra el electrón pero sí podemos describir su posible localización. El contorno orbital indica la existencia de mas de un 90% probabilidad de encontrar al electrón en el espacio definido por dicho contorno.

Según la mecánica cuántica, los electrones se colocan en regiones concéntricas al núcleo. Cada región, o nivel, contiene subregiones que son los orbitales atómicos. Cada orbital atómico tiene una energía característica que viene dada por la ecuación de Schrödinger.

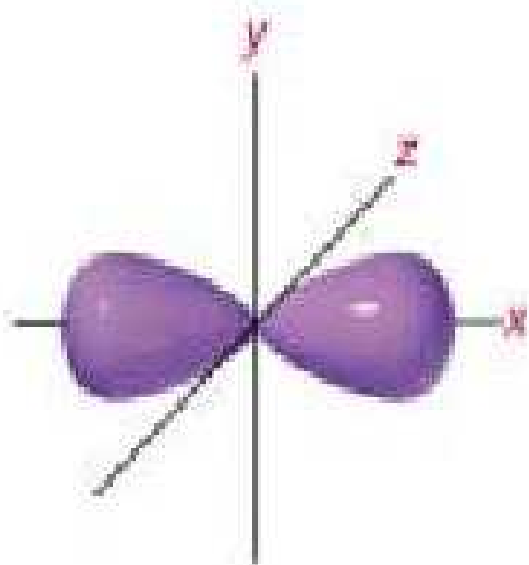
Así, la primera región contiene sólo al **orbital s** y consiste en una región esférica en cuyo centro se encuentra el núcleo¹.



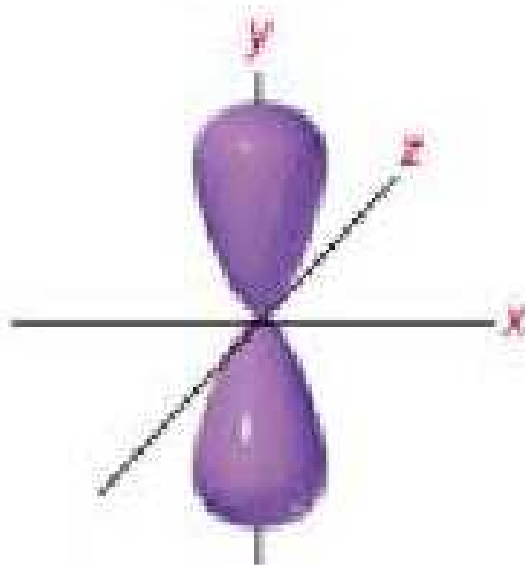
Orbital atómico 1s

<http://es.geocities.com/quimicorganica>

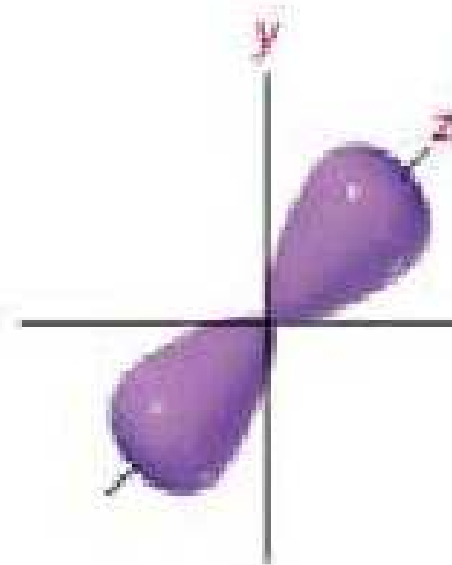
La segunda región contiene 1 orbital s (esférico) y 3 orbitales p, que son mutuamente perpendiculares entre sí. En la siguiente figura se indica la forma de cada uno de los orbitales 2p.



Orbital atómico 2p_x



Orbital atómico 2p_y

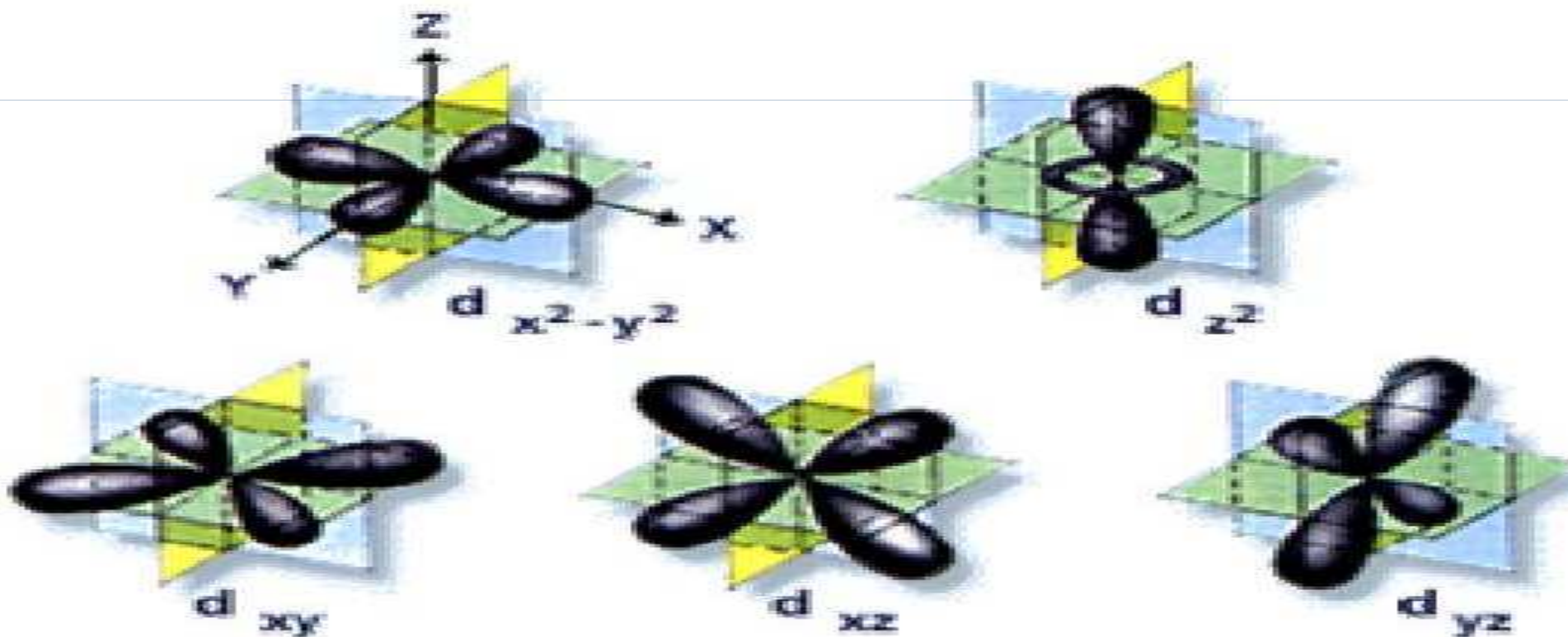


Orbital atómico 2p_z



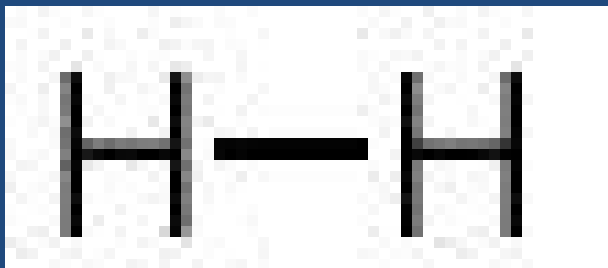
El tercer nivel cuántico posee 1 orbital s, 3 orbitales p y 5 orbitales d, cuya forma y orientación se dan en la siguiente figura:

Caracter direccional de los orbitales atómicos 3d



2. Teoría de orbitales moleculares (OM).

Según la teoría de orbitales moleculares (OM), los enlaces covalentes de las moléculas se forman por solapamiento de orbitales atómicos, de manera que los nuevos orbitales moleculares pertenecen a la molécula entera y no a un átomo sólo. Para comprender mejor esta teoría describiremos primero el enlace en una molécula de H_2 .



En esta molécula el orbital 1s de uno de los átomos de hidrógeno se solapa con el orbital 1s del otro hidrógeno formándose un orbital molecular. La densidad electrónica del OM es mayor en la región de solapamiento. El enlace que se forma cuando dos orbitales s solapan se denomina enlace sigma (σ). Los electrones en un enlace s se encuentran simétricamente distribuidos alrededor de un eje internuclear.

Durante la formación del enlace, los dos orbitales se acercan uno a otro y comienzan a solapar, liberándose energía a medida que el electrón de cada átomo es atraído por la carga positiva del núcleo del otro átomo. Cuanto mayor sea el solapamiento, mayor será el desprendimiento de energía y, por tanto, menor será la energía del Orbital Molecular (OM). Si el proceso de aproximación de los átomos continua, los núcleos atómicos pueden llegar a repelerse mutuamente, lo cual hace que la energía del

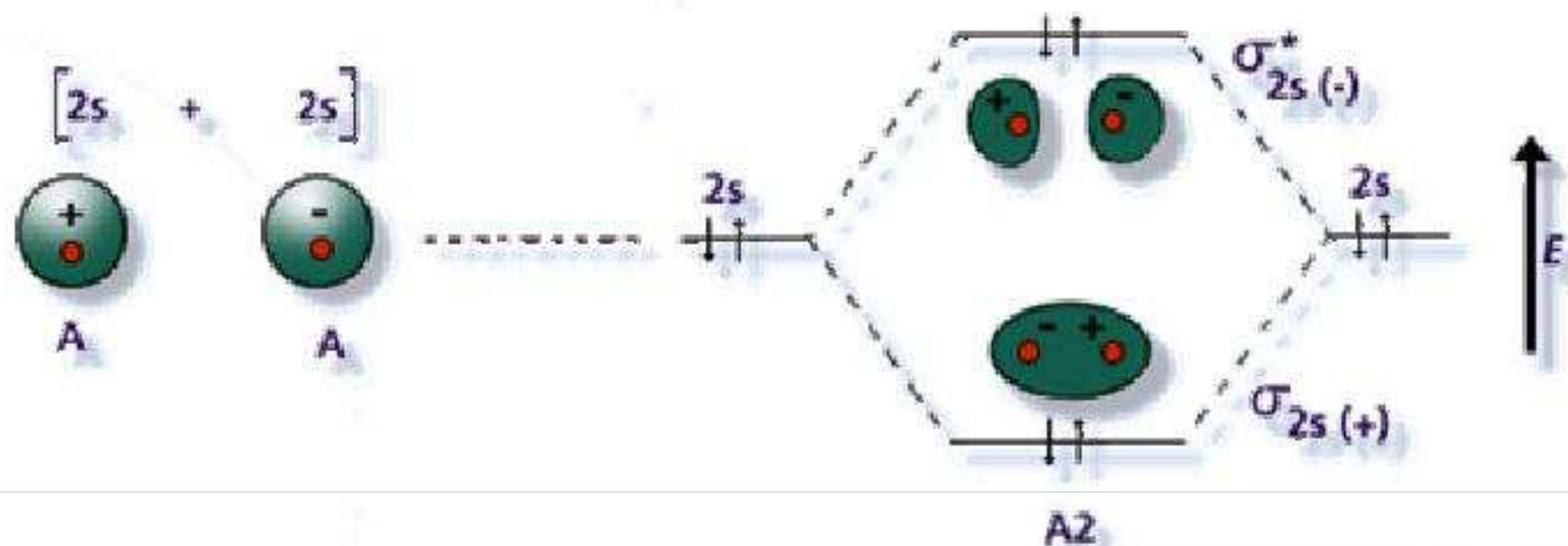
sistema aumente. Esto significa que la máxima estabilidad (mínima energía) se alcanza cuando los núcleos se encuentran a una distancia determinada que se conoce con el nombre de longitud de enlace.

Según la teoría de Orbitales Moleculares (OM) el número de éstos es igual al número de orbitales atómicos (OA) que se solapan. En el caso de la molécula de hidrógeno se solapan dos OA y por tanto se formarán dos nuevos OM. El OM de menor energía se forma cuando se

solapan los dos OA que están en fase. Este orbital contiene a los dos electrones y mantiene a los dos átomos unidos, por lo que se denomina OM enlazante

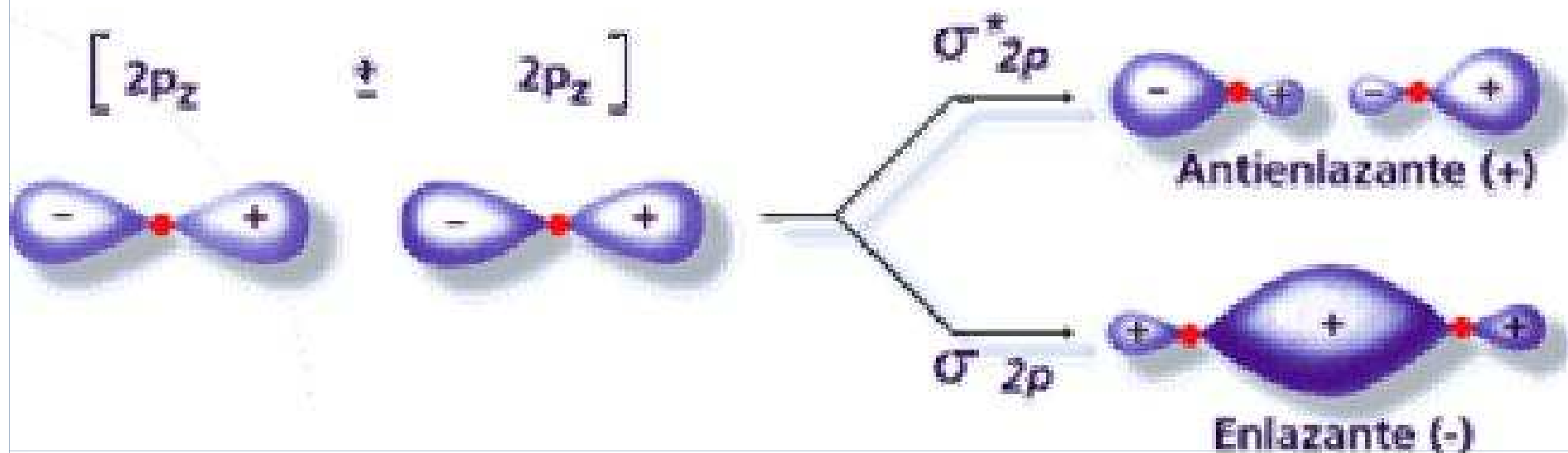
El otro OM de la molécula de hidrógeno se forma cuando los dos OA que solapan no están en fase. Cuando esto ocurre los OA se cancelan mutuamente y se forma un nodo entre los dos núcleos. Este OM se denomina antienlazante y su energía es superior a la suma de las energías de los OA separados.

Formación de los OM en la molécula de hidrógeno



<http://es.geocities.com/quimicorganica>

Formación de los OM en la molécula de flúor



<http://es.geocities.com/quimicorganica>

El enlace covalente de la molécula de flúor (F_2) también se puede explicar mediante la teoría de Orbitales Moleculares. En este caso el OM enlazante resulta del solapamiento de dos orbitales atómicos $2p$ de cada uno de los

átomos de flúor. Al igual que los orbitales s los orbitales p pueden solapar de dos formas distintas. Si los dos orbitales p se encuentran sobre el mismo eje, y están en fase, se solapan

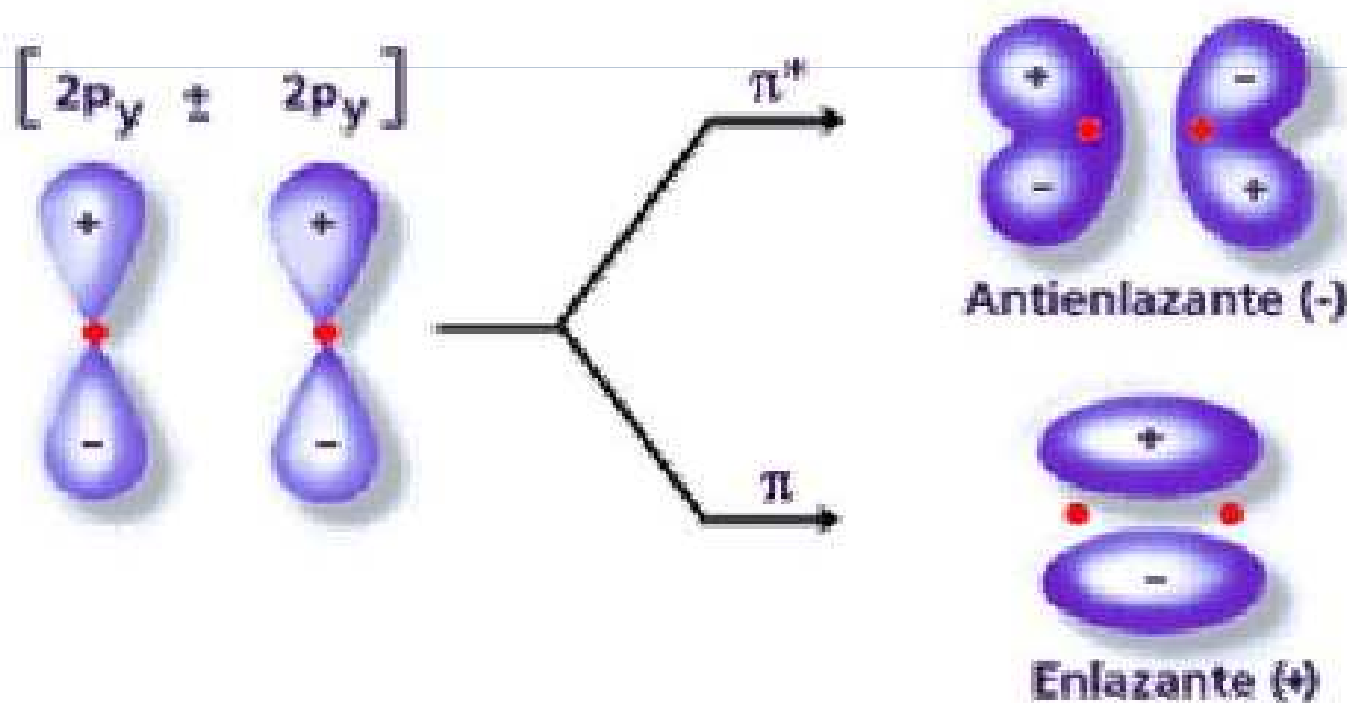
frontalmente y se forma un OM enlazante que genera un enlace tipo sigma. Si los lóbulos están desfasados se forma un OM antienlazante (σ^*), que se caracteriza por situar entre los dos núcleos dos lóbulos pequeños que están en fases opuestas.

Como se acaba de ver en el caso de la molécula de F_2 el solapamiento frontal de dos orbitales atómicos p forma dos nuevos orbitales moleculares de tipo sigma. Además del solapamiento frontal, los orbitales atómicos p también pueden solapar lateralmente. Cuando esto ocurre se forman orbitales moleculares de tipo π . Si el solapamiento lateral de los orbitales p tiene lugar cuando estos están en fase el orbital molecular p que se forma es de carácter enlazante. Por el contrario, si los orbitales p que solapan no están en fase se

origina un orbital molecular pi antienlazante (π^*).

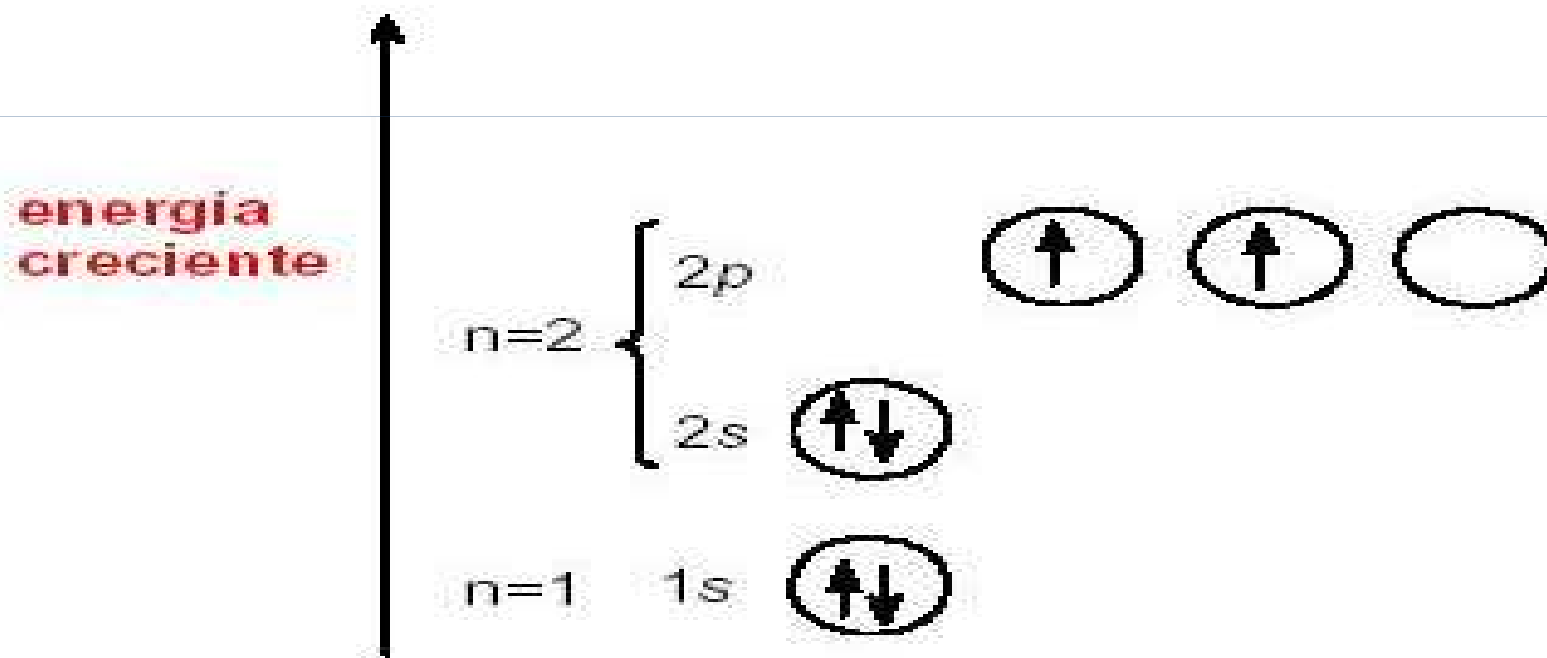
Orientación con respecto de los núcleos de los orbitales moleculares pi y π^* :

Formación de orbitales moleculares π y π^* por solapamiento lateral de OA p



HIBRIDACION DEL CARBONO

Un átomo de carbono en su estado fundamental tendría dos electrones desapareados, tal y como se indica a continuación:

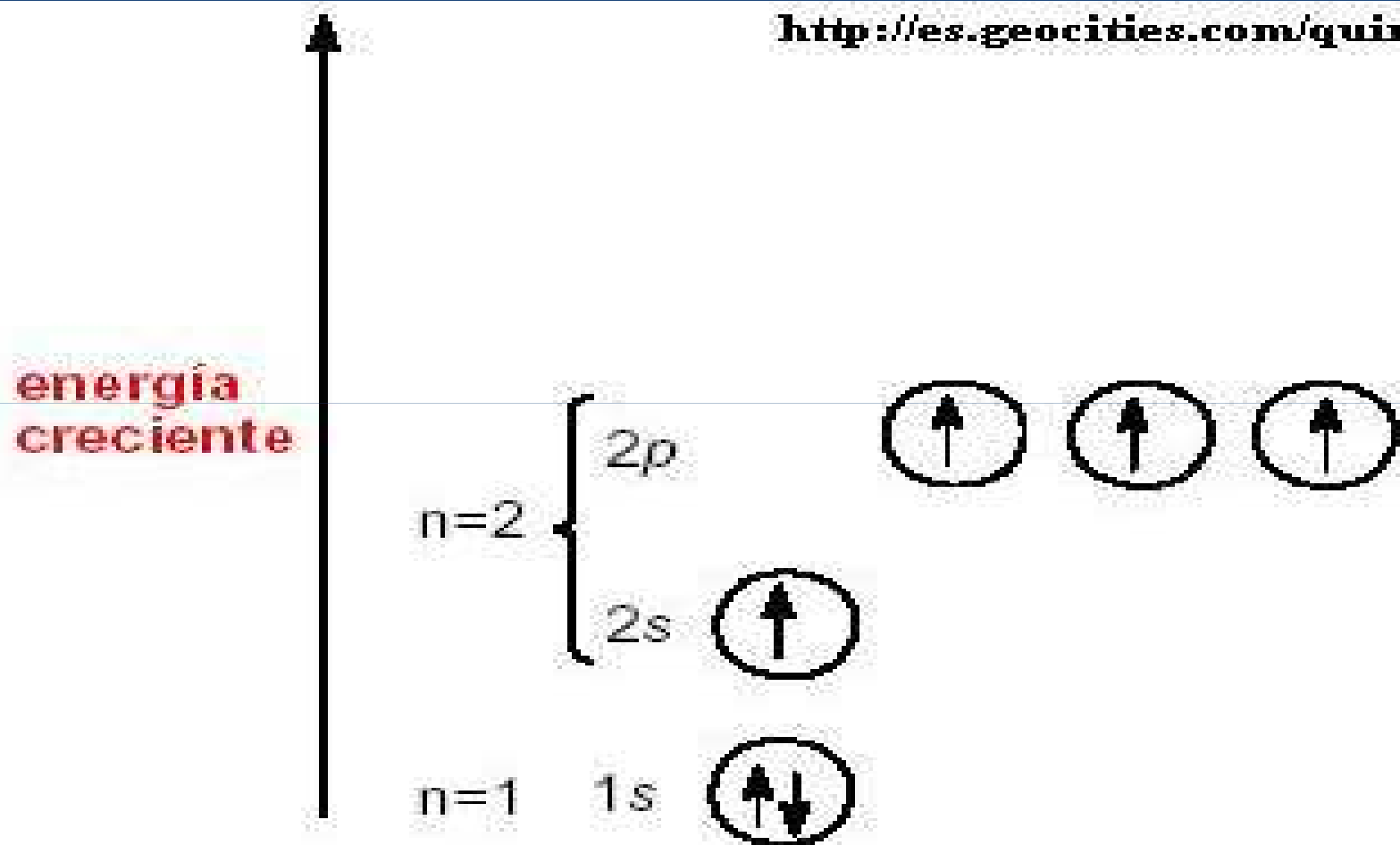


estado electrónico fundamental del carbono

Como el átomo de carbono en su estado fundamental sólo contiene dos electrones desapareados se debería esperar que, en lugar de formar CH_4 , el carbono se uniera sólo a dos átomos de hidrógeno y formara un compuesto de fórmula CH_2 , dejando vacío un orbital $2p$. El CH_2 es una especie química conocida, llamada **carbeno**, pero es una sustancia muy reactiva y de tiempo de vida media muy corto. Por adición de 96 kcal/mol de energía a un átomo de carbono, uno de los electrones $2s$ puede promocionarse hasta alcanzar el orbital

vacío 2p, dando lugar a la configuración electrónica indicada a continuación:

<http://es.geocities.com/quimicorganica>

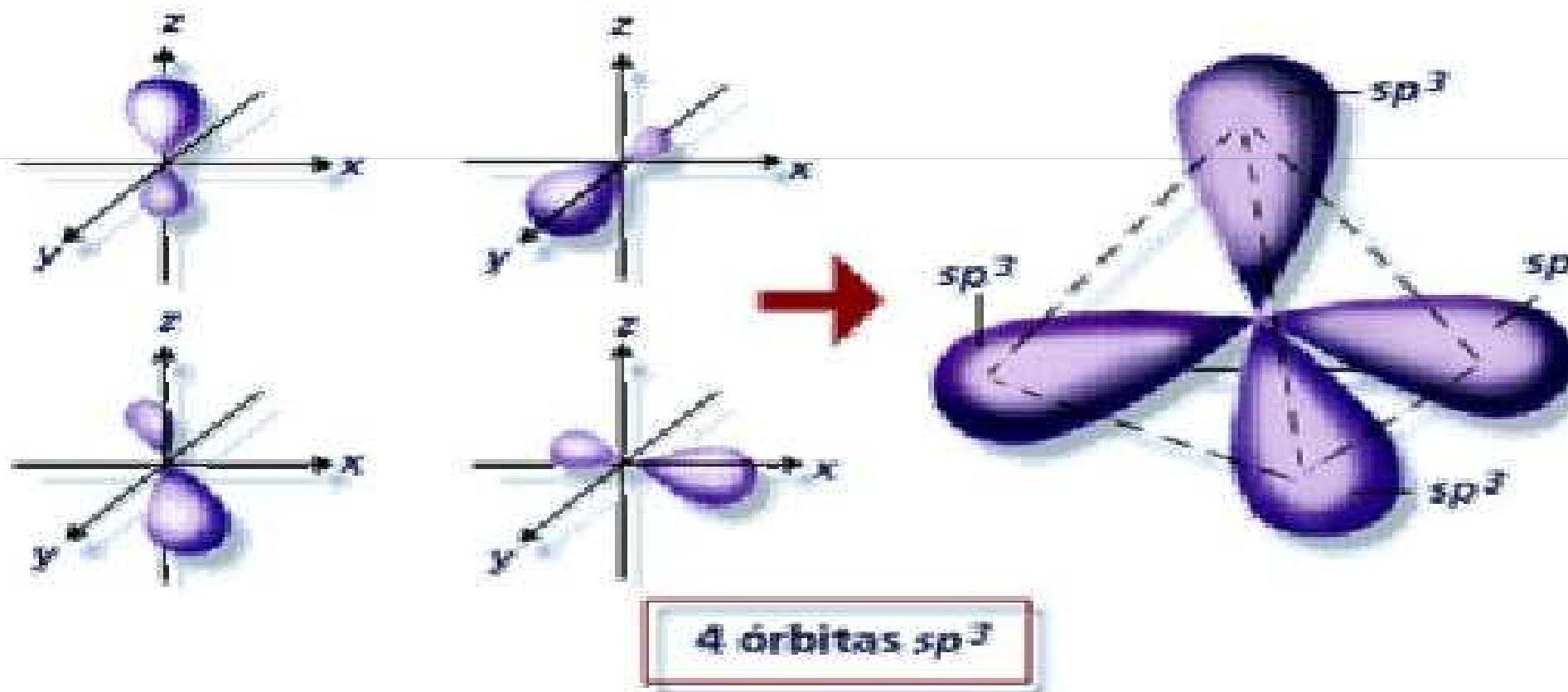


estado electrónico del átomo de carbono excitado

Al promocionar un electrón desde el orbital 2s al 2p el átomo de carbono tiene disponibles cuatro electrones para formar cuatro enlaces covalentes y de esta forma puede conseguir la configuración electrónica de gas noble. La formación de un enlace covalente produce un descenso de energía en el sistema, que en el caso de un enlace C-H se cifra en 87 kcal/mol. Por tanto, la formación de dos enlaces covalentes más en el átomo de carbono provocará un descenso de 174 kcal/mol de energía (2×87 kcal/mol), que compensa

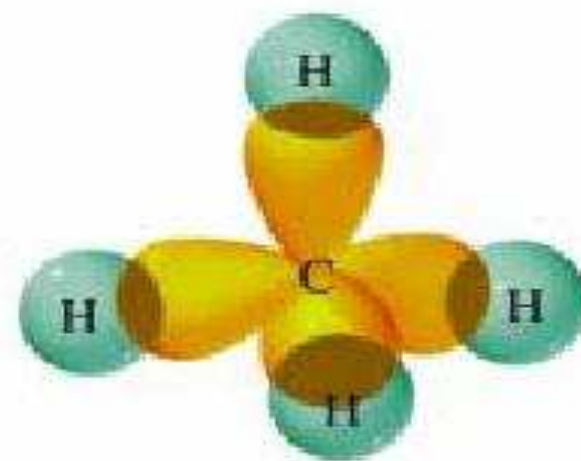
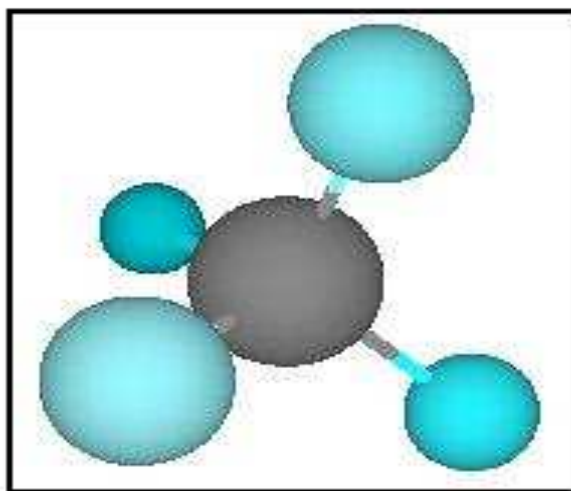
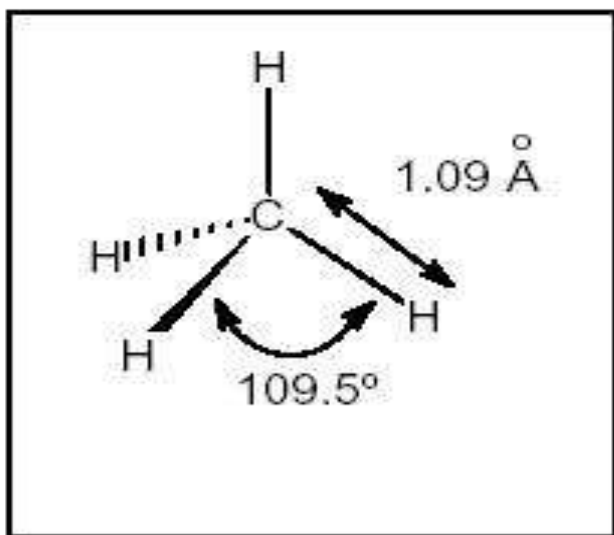
sobradamente los 96 kcal/mol que se requieren para promover al átomo de carbono desde el estado fundamental al estado excitado.

Formación de los orbitales híbridos sp^3



En conclusión, la participación de los orbitales híbridos sp^3 permite explicar la forma de la molécula del metano, que es un tetraedro perfecto con distancias de enlace C-H de 1.09 \AA y ángulos de enlace de 109.5° , tal y como se indica en las figuras que se dan a continuación:

Distancias y ángulos de enlace en la molécula de metano

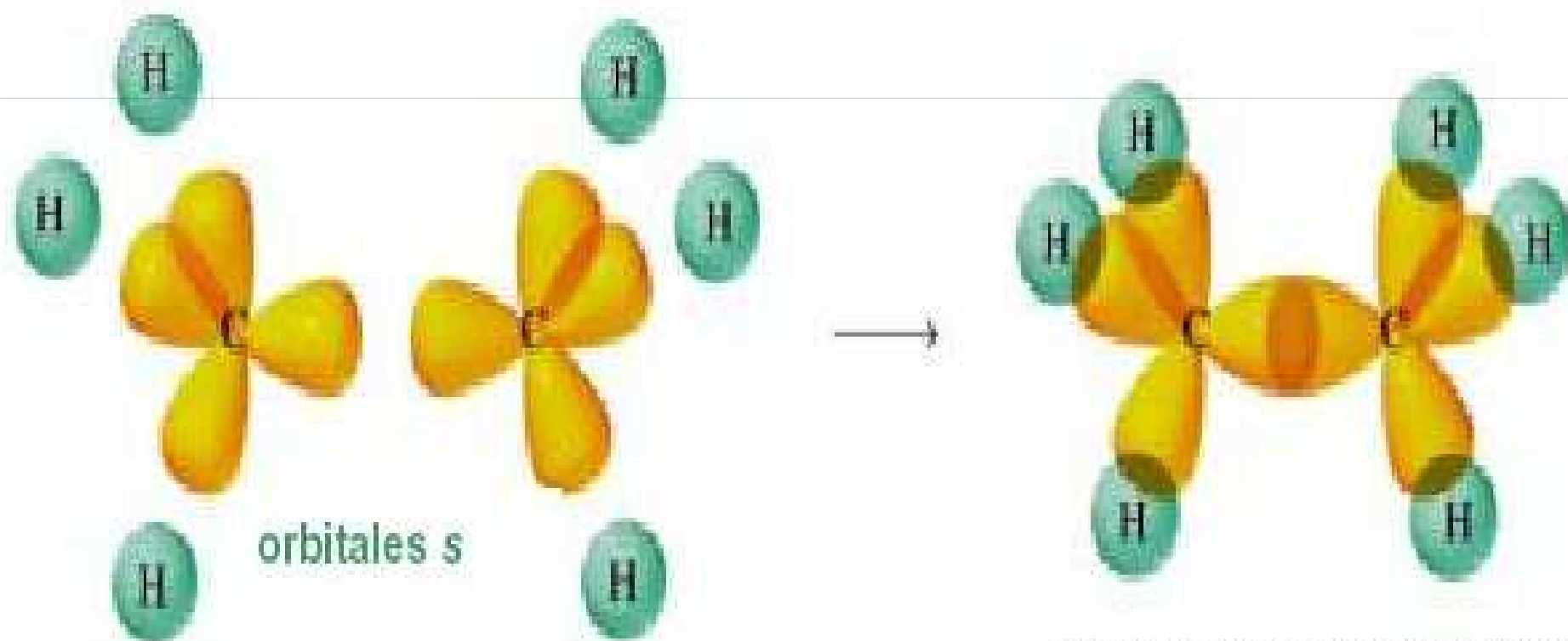


La molécula de etano.

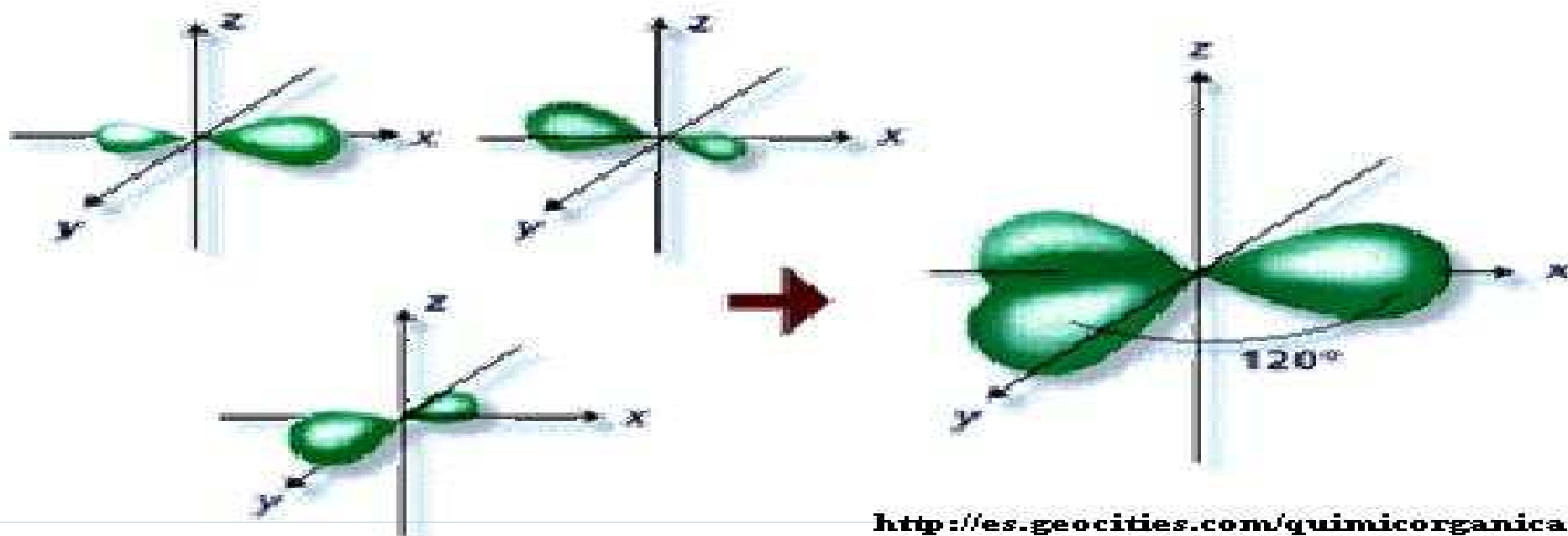
El etano es un hidrocarburo de fórmula molecular C_2H_6 . Su estructura se puede explicar admitiendo que los dos átomos de carbono presentan hibridación sp^3 , de manera que el enlace covalente C-C se forma por solapamiento de dos orbitales híbridos sp^3 , uno de cada átomo de carbono, quedando en cada uno otros tres orbitales híbridos para solapar con los orbitales s de los seis átomos de hidrógeno. Como en el caso del metano cada átomo de carbono se sitúa en el centro de un tetraedro

cuyos vértices lo ocupan ahora tres átomos de hidrógeno y el otro carbono.

Formación de enlaces en la molécula de etano



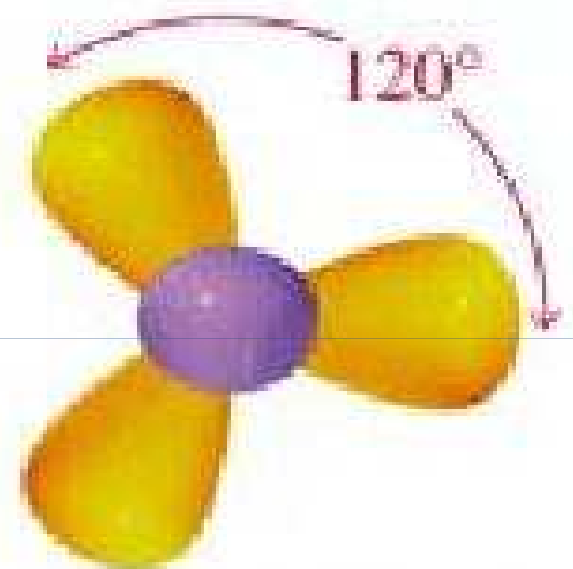
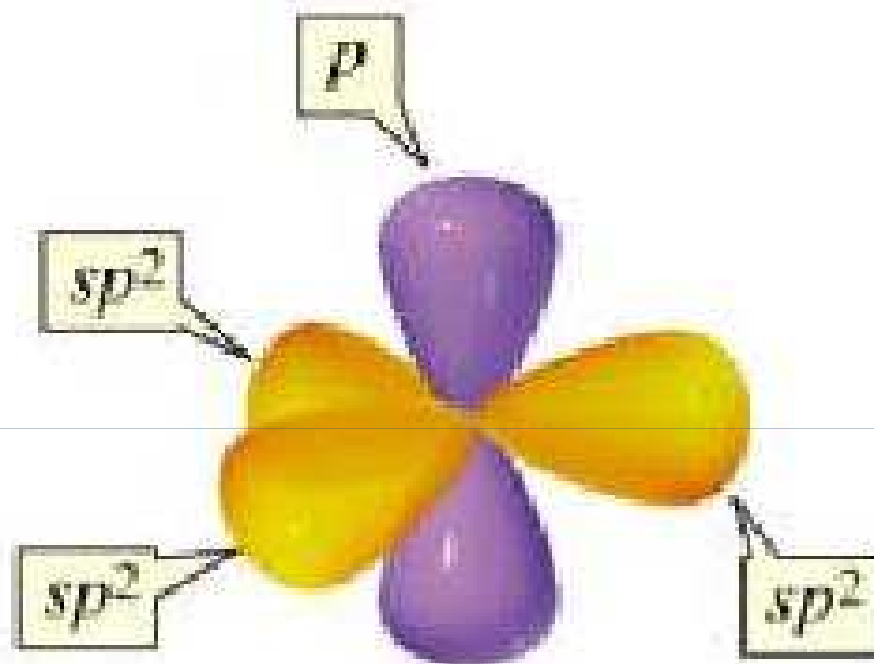
Formación de orbitales híbridos sp^2



<http://es.geocities.com/quimicorganica>

continuación, se representa la configuración orbitálica de un átomo de carbono sp^2 . La visión frontal permite apreciar la colocación perpendicular del orbital atómico p con respecto del plano que contiene a los tres orbitales híbridos sp^2 .

Vista frontal y vista superior de un átomo
de carbono con hibridación sp^2



<http://es.geocities.com/quimicorganica>

Cuando dos átomos de carbono con hibridación sp^2 se solapan frontalmente se forma un enlace sigma (σ) carbono-carbono, quedando sobre cada átomo de carbono dos orbitales híbridos sp^2 y un orbital $2p$ no hibridizado. En la molécula de etileno los orbitales híbridos sp^2 que no se han empleado en la construcción del enlace C-C se solapan con los orbitales $1s$ de cuatro átomos de hidrógeno dando lugar a cuatro enlaces σ C sp^2 -H $1s$.

Sobre cada átomo de carbono queda un orbital 2p, que consta de dos lóbulos a los que se les asigna el signo + y el signo -. Estos signos no representan cargas sino el signo algebraico de la función de onda en las dos regiones o lóbulos que constituyen el orbital atómico p. En la página 5 ya se ha explicado que el solapamiento lateral de dos orbitales atómicos p origina dos orbitales moleculares, uno de carácter enlazante (p) y uno de carácter antienlazante (p^*). Para que los orbitales 2p se puedan solapar en la

molécula de etileno se requieren que orienten

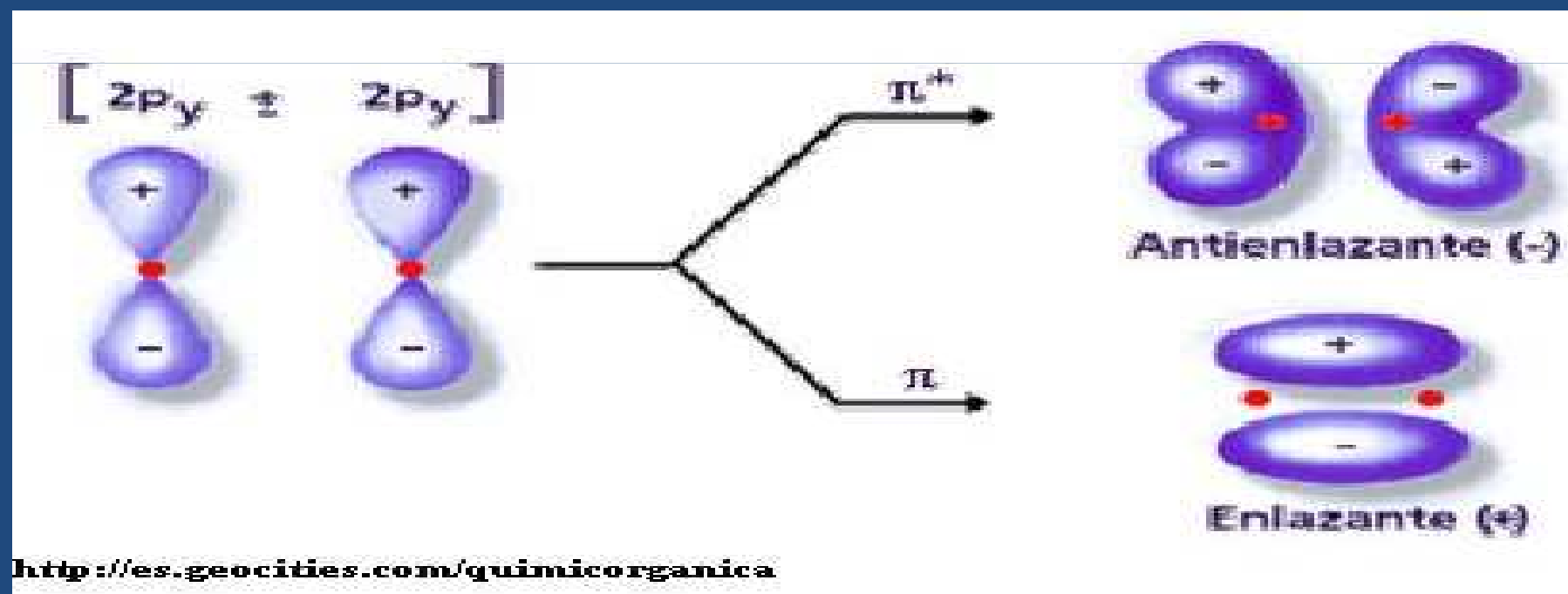
molécula de etileno se tienen que orientar paralelamente entre sí y perpendicularmente a la molécula de etileno se tienen que orientar paralelamente entre sí y perpendicularmente a la estructura de los enlaces s. Para que esto ocurra, la estructura de los enlaces s tiene que ser coplanar: los seis núcleos atómicos implicados en el enlace de la molécula de etileno tienen que estar situados en el mismo plano

En este caso, los dos orbitales p se sitúan paralelamente y están lo suficientemente cerca para poderse solapar. El solapamiento puede tener lugar de dos formas diferentes:

a) Si los dos orbitales 2p que se solapan están en fase se forma el orbital molecular enlazante π .

b) Si los dos orbitales 2p que se solapan no están en fase se forma el orbital molecular antienlazante π^* .

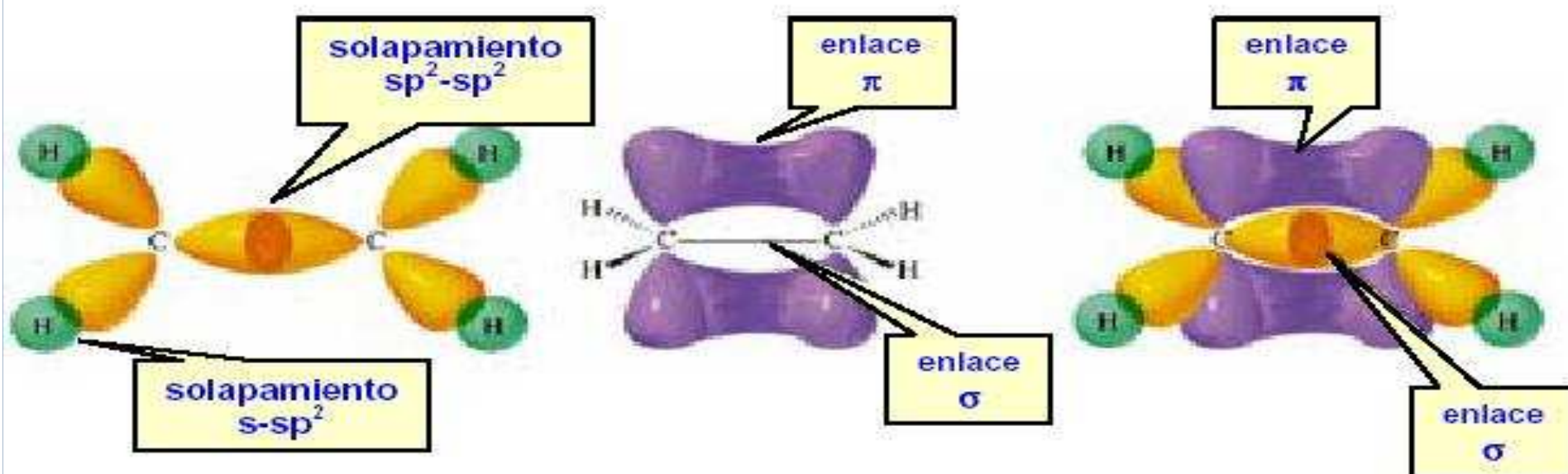
En la siguiente figura se describe la formación de los orbitales moleculares π y π^* por interacción entre los dos orbitales atómicos p .



En el estado fundamental de un alqueno, los dos electrones que forman el enlace pi entre los átomos de carbono se sitúan en el orbital molecular enlazante pi.

El solapamiento de los orbitales p es menos eficaz que el solapamiento frontal sp^2-sp^2 , que forma el enlace sigma. Por consiguiente un enlace pi es más débil que un enlace sigma.

En la siguiente figura se indican los tres tipos de enlaces covalentes de la molécula de etileno: un enlace sigma (solapamiento Csp^2-Csp^2), un enlace sigma (solapamiento Csp^2-H1s) y el enlace pi (solapamiento $Cp-Cp$):

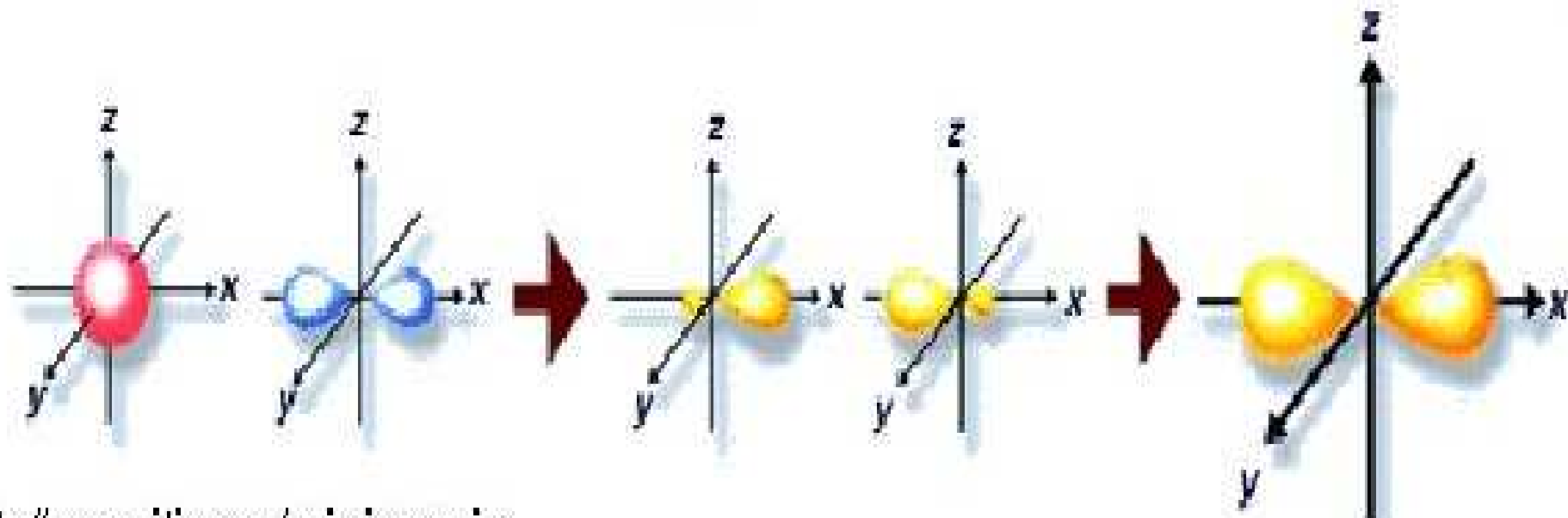


6. La molécula de acetileno.

El acetileno es un gas de fórmula molecular C_2H_2 . La molécula de acetileno es lineal que se puede explicar admitiendo que cada átomo de carbono presenta una hibridación sp . Los orbitales híbridos sp se forman por combinación de un orbital atómico $2s$ con un orbital atómico $2p$, quedando sin hibridizar los otros dos orbitales atómicos $2p$. Para ente figura.

disminuir la repulsión entre los electrones de los orbitales híbridos sp éstos se colocan en el mismo plano formando entre ellos un ángulo de 180° , tal y como se indica en la siguiente figura.

Formación de dos orbitales híbridos sp por combinación de un orbital s y un orbital p



Los dos orbitales atómicos 2p que no se han empleado en el proceso de hibridación se colocan perpendiculares entre sí y perpendiculares al sistema de orbitales híbridos sp , tal y como se indica en la figura que se da a continuación:

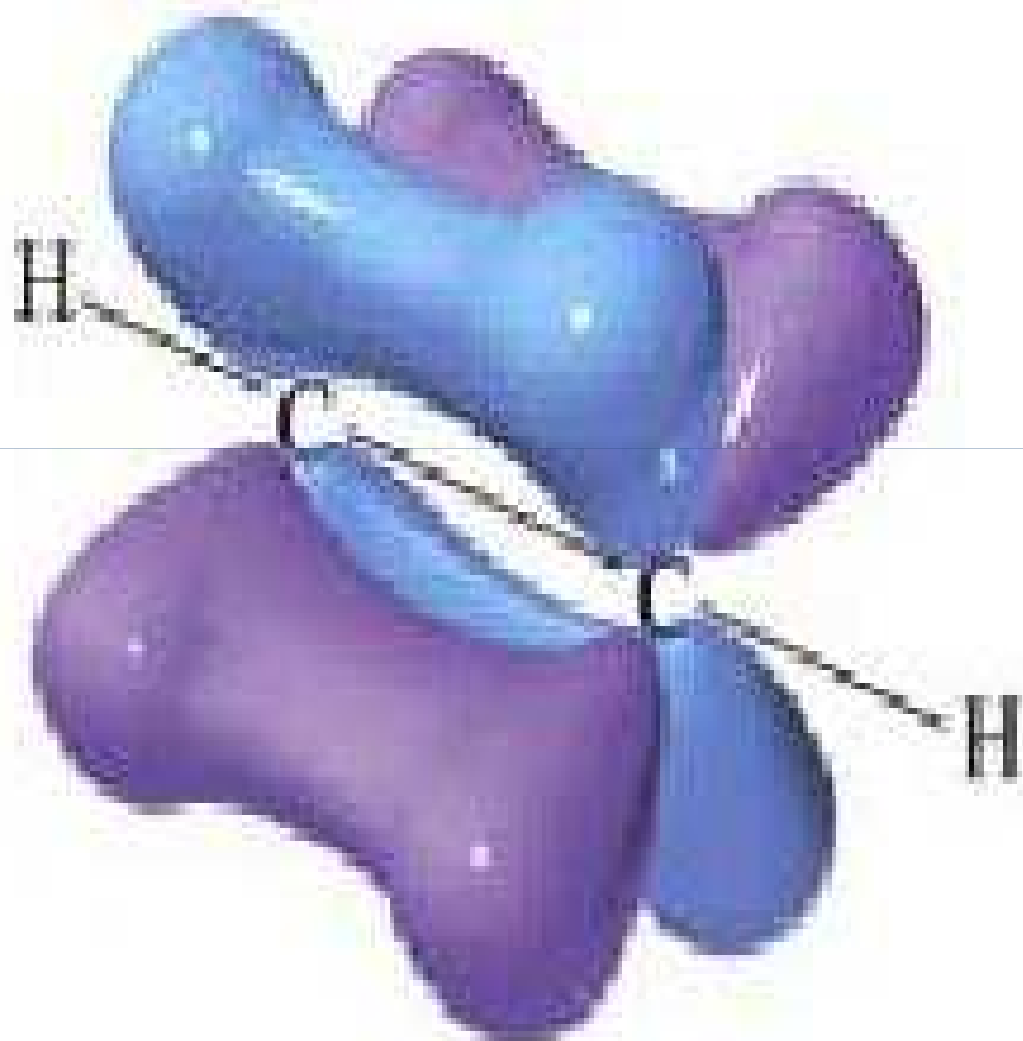
Configuración orbital de un átomo de carbono con hibridación sp



<http://es.geocities.com/quimicorganica>

El solapamiento frontal de dos orbitales híbridos sp genera el enlace sigma C-C de la molécula de acetileno. Los dos orbitales híbridos sp restantes se solapan con los orbitales $1s$ de dos átomos de hidrógeno para dar lugar a dos enlaces covalentes C-H de tipo sigma. El sistema de orbitales sigma de la molécula de acetileno se indica a continuación:

Densidad electrónica π en la molécula de acetileno



Los tres tipos de enlaces que constituyen la molécula de acetileno, enlace sigma (solapamiento Csp-Csp), enlace sigma (solapamiento Csp-H1s) y enlaces pi (solapamiento Cp-Cp) se representan en la figura que se da a continuación:

Sistema de enlaces σ y π de la molécula de acetileno

