

## Hibridación de orbitales.

Las formas características de enlace del átomo de carbono en los compuestos orgánicos se describe frecuentemente de acuerdo con el modelo de

hibridación de orbitales (Linus Pauling, 1930)

y los resultados obtenidos con la aplicación de este modelo concuerdan con la información experimental obtenida.

## Hibridación de orbitales

La **hibridación de orbitales**, en términos simples,

*es un procedimiento matemático que implica la combinación de*

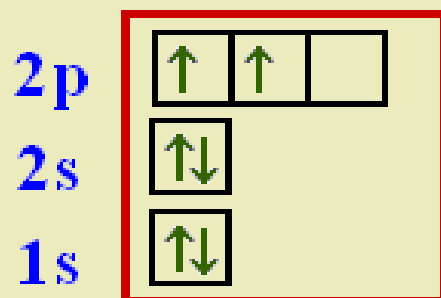
*las funciones de onda individuales para los orbitales atómicos (puros)  $s$  y  $p$  a fin de obtener funciones de onda para los nuevos orbitales atómicos híbridos con diferentes formas y orientaciones.*

## Hibridación de orbitales

A continuación se muestra un “*resumen*” del procedimiento de hibridación y

las posibles hibridaciones que puede tomar el átomo de carbono en base a la combinación matemática de sus orbitales atómicos *s* y *p*.

# Hibridación de orbitales.

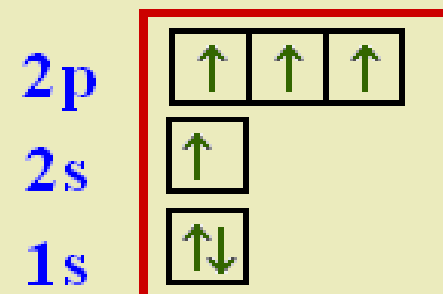


Estado Fundamental  
(basal, no excitado)  
del átomo de Carbono

Configuración Electrónica

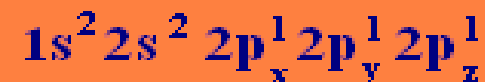


Excitación  
→  
(promoción de un  
 $e^-$  2s al 2p)



Estado Excitado  
del átomo de Carbono

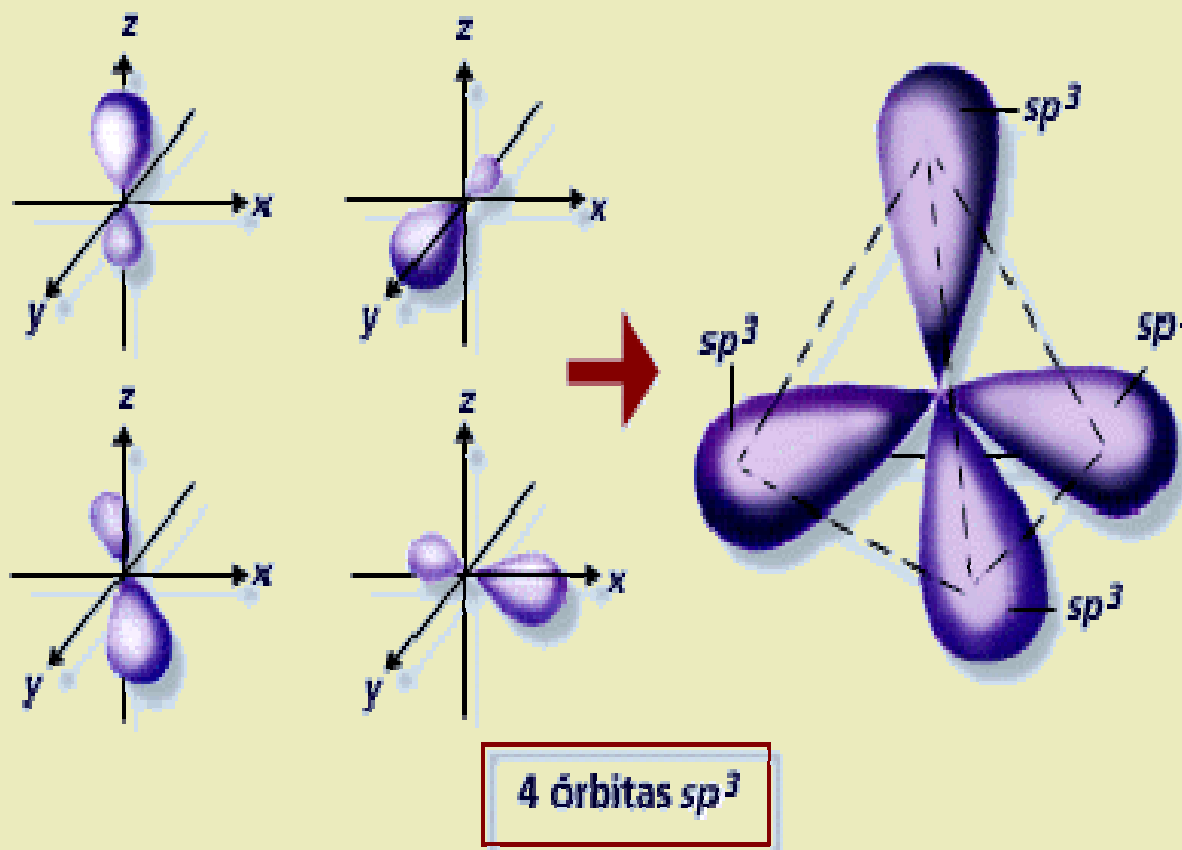
Configuración Electrónica

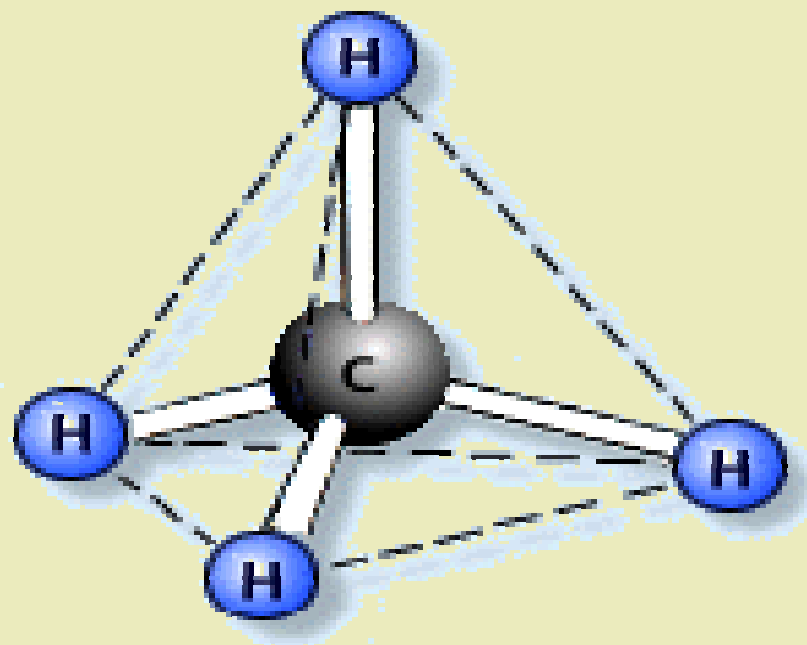
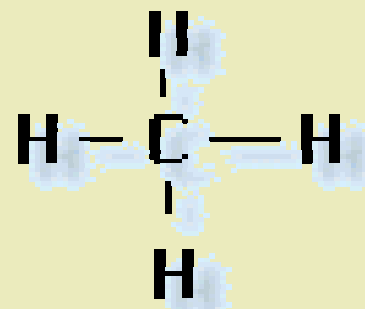
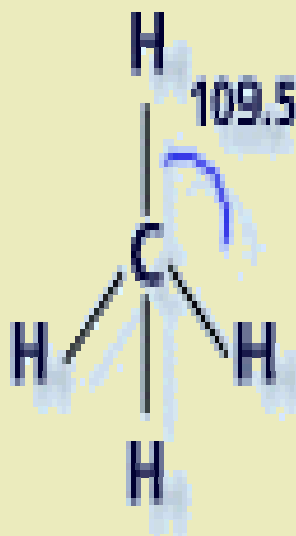
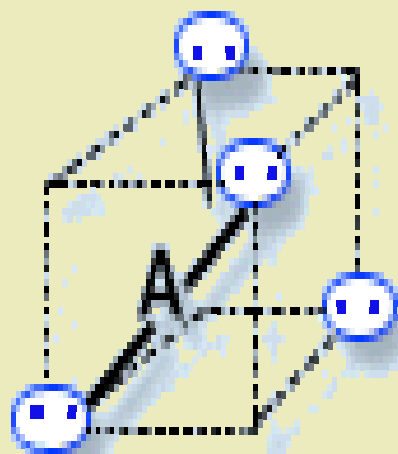


Hibridación ←

# HIBRIDACIÓN $sp^3$

La mezcla de un 2s con tres 2p se denomina Hibridación  $sp^3$ .

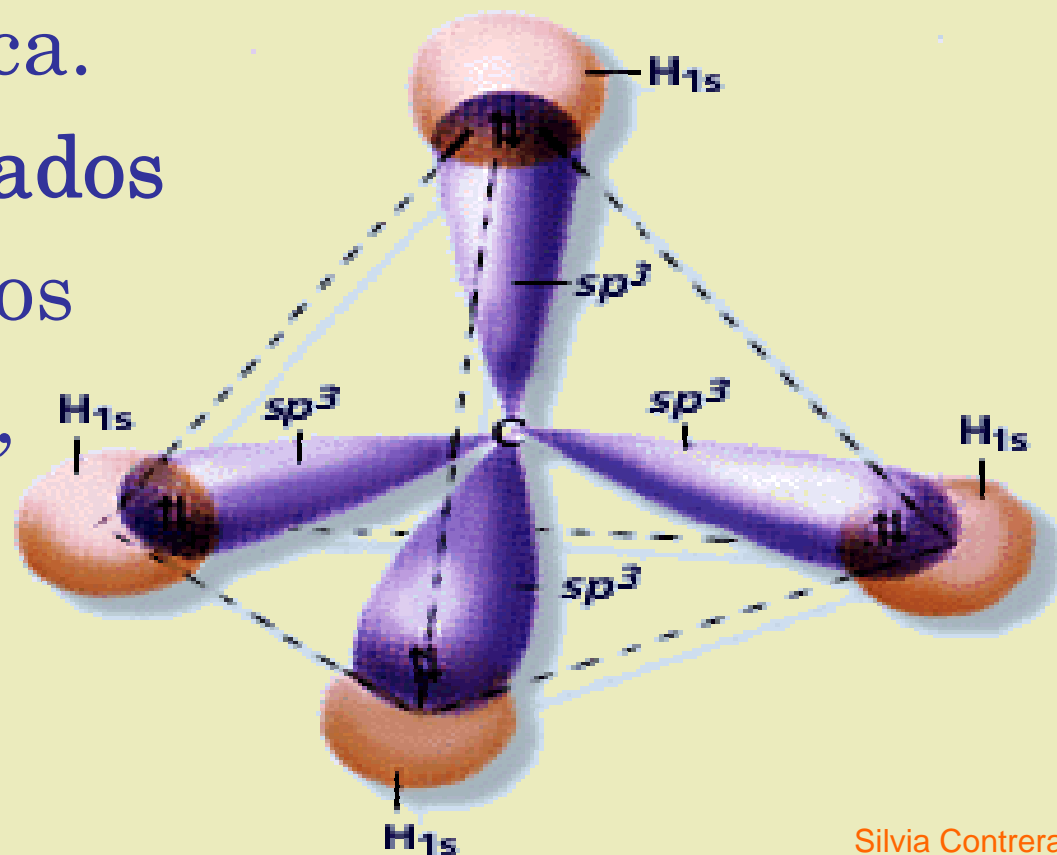


HIBRIDACIÓN  $sp^3$ 

## HIBRIDACIÓN $sp^3$

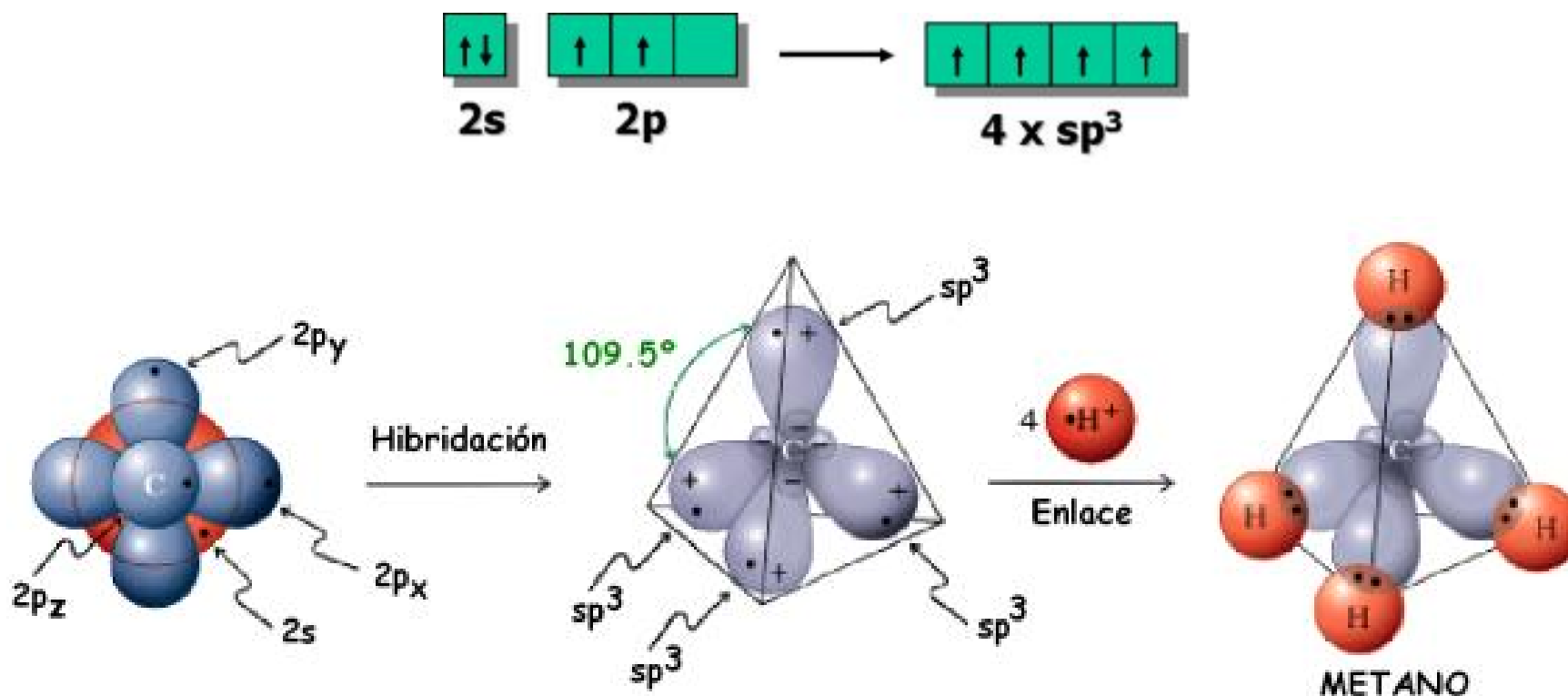
Así, en cada uno de los vértices marcados " $sp^3$ " se encuentra el átomo C para formar enlaces con los H y formar la molécula de metano, con disposición tetraédrica.

Los electrones apareados ocupan la región de los enlaces que, a su vez, forman el octeto alrededor del C.



$sp^3$

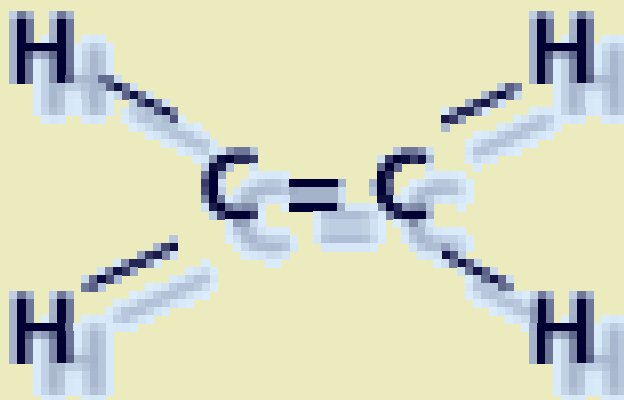
**Cuatro regiones de densidad electrónica alrededor del C**



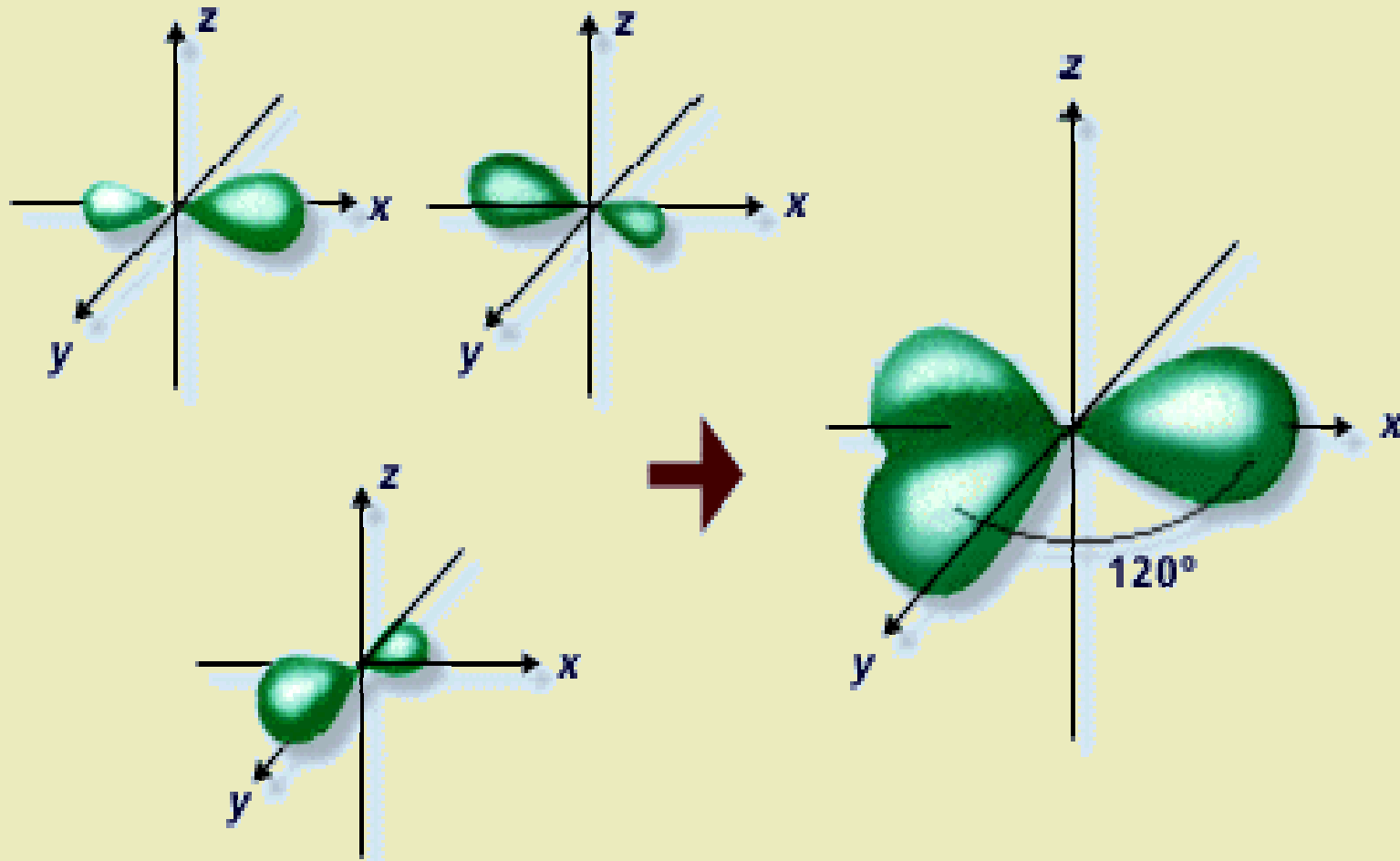


## HIBRIDACIÓN $sp^2$ .

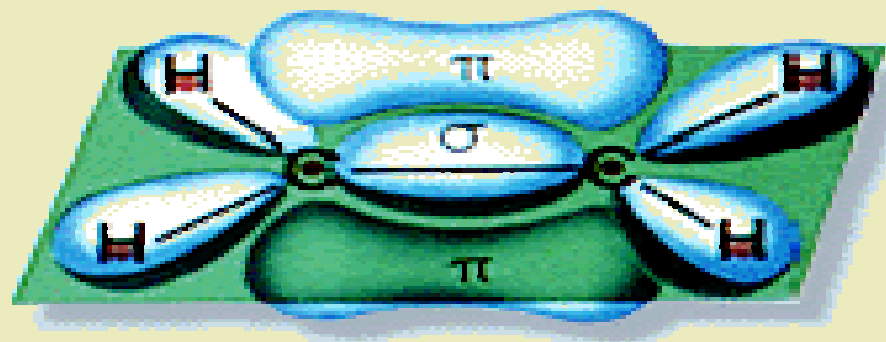
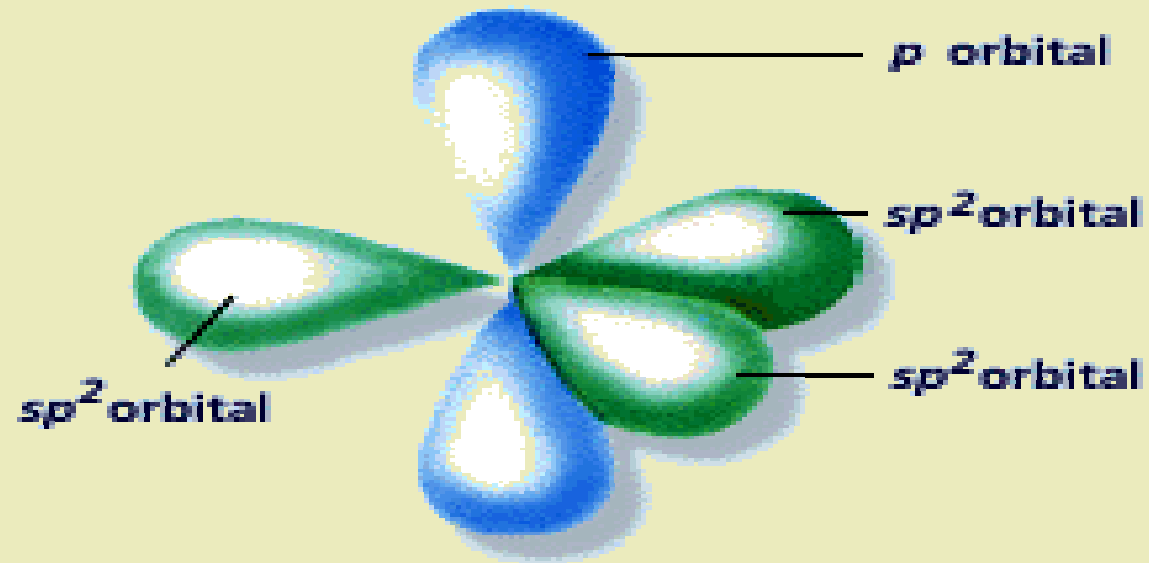
Iniciemos el estudio de esta hibridación usando como ejemplo, la molécula "etileno",  $C_2H_4$ , de gran importancia en la industria del plástico.



# HIBRIDACIÓN $sp^2$ .

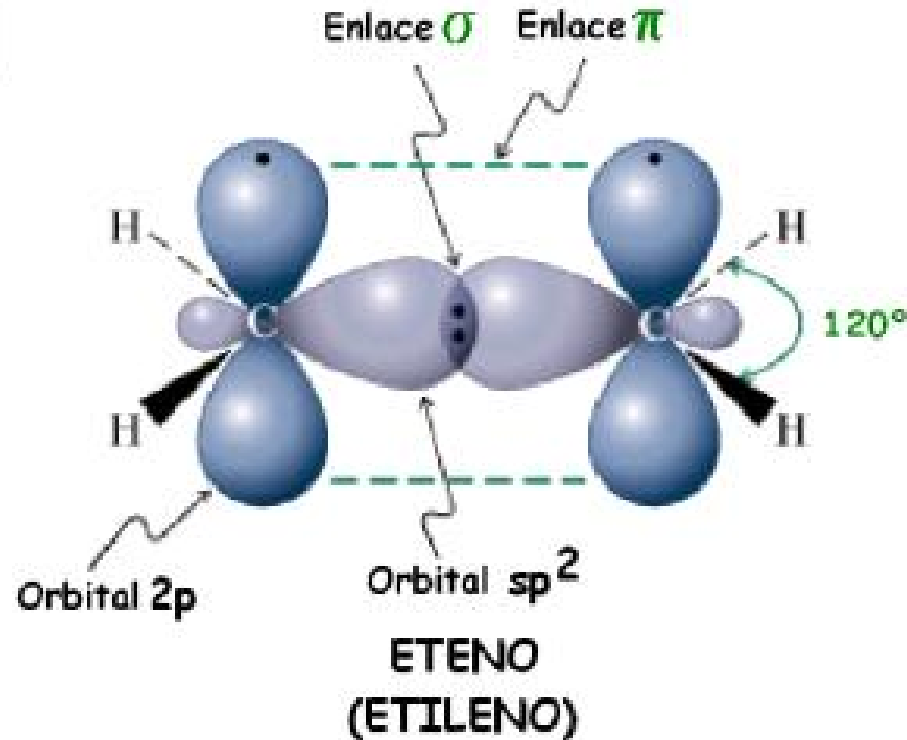
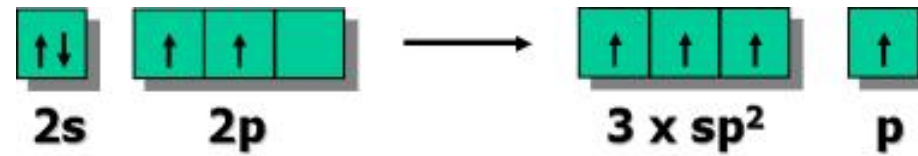


# HIBRIDACIÓN $sp^2$ .

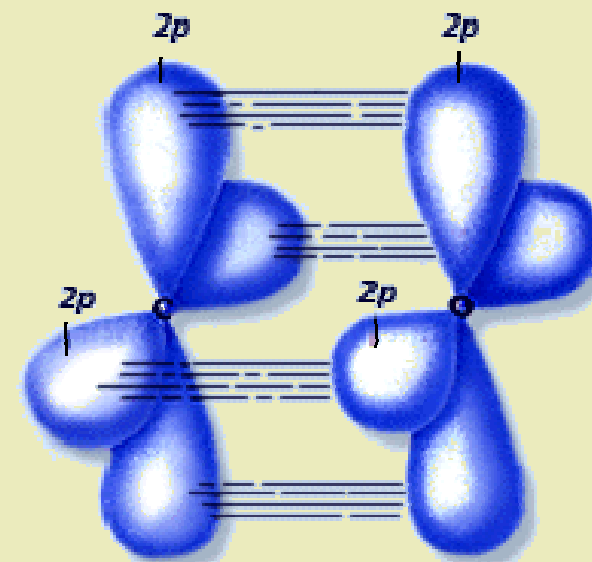
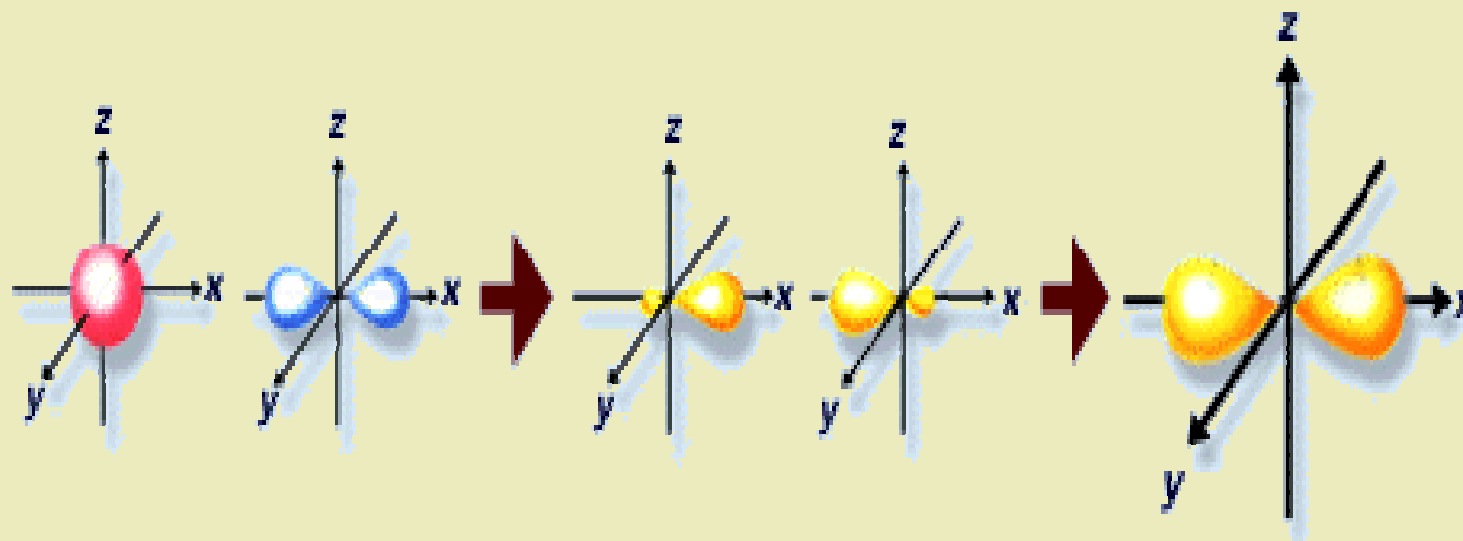


$sp^2$

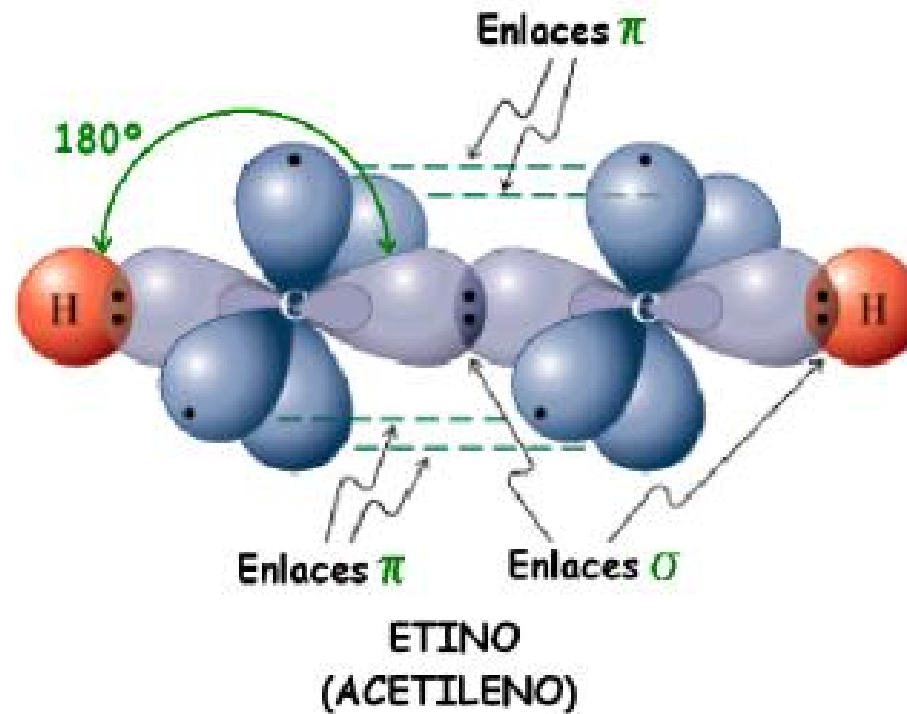
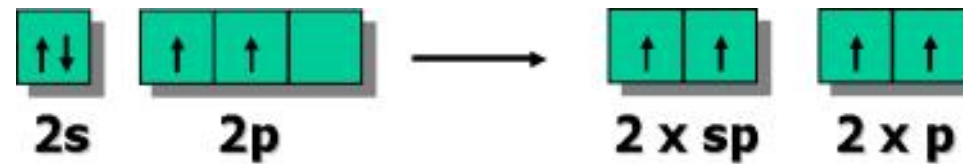
Tres regiones de densidad electrónica alrededor del C



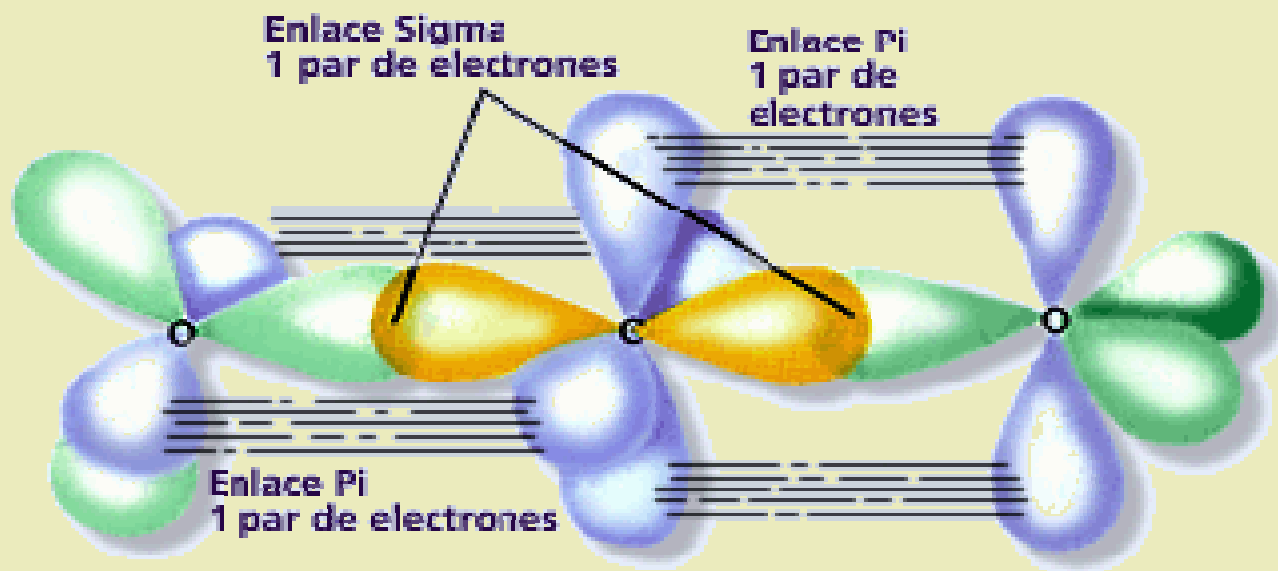
# HIBRIDACIÓN *sp*.



*sp*  
Dos regiones de densidad electrónica  
alrededor del C

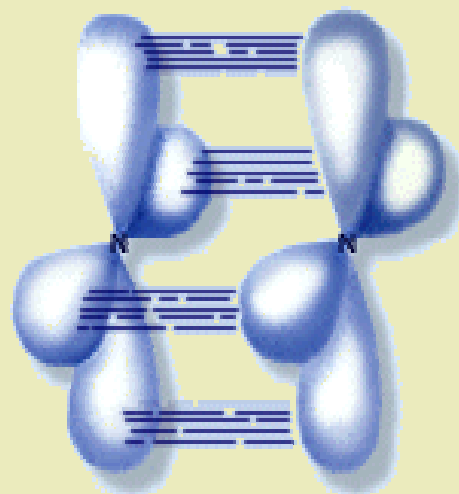
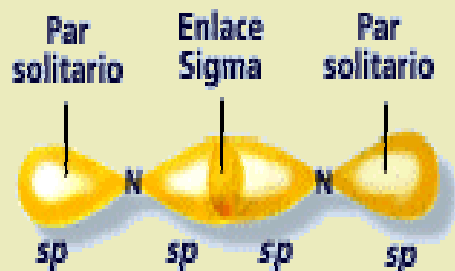
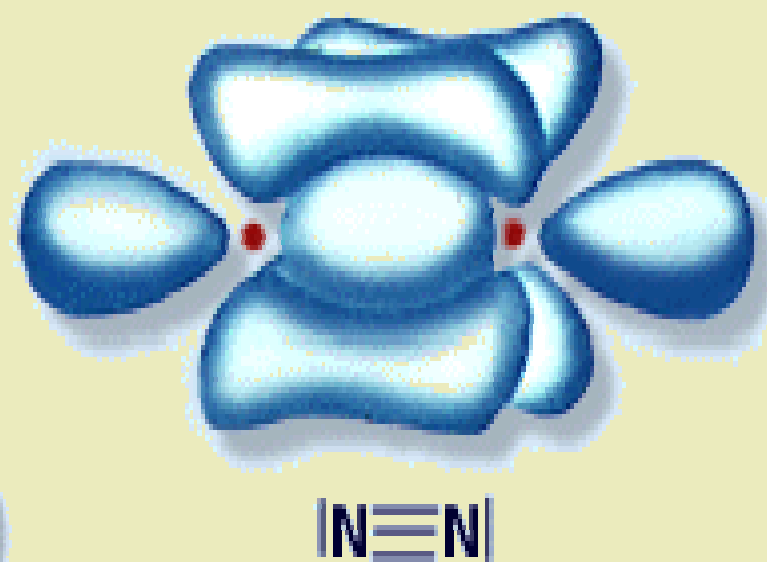
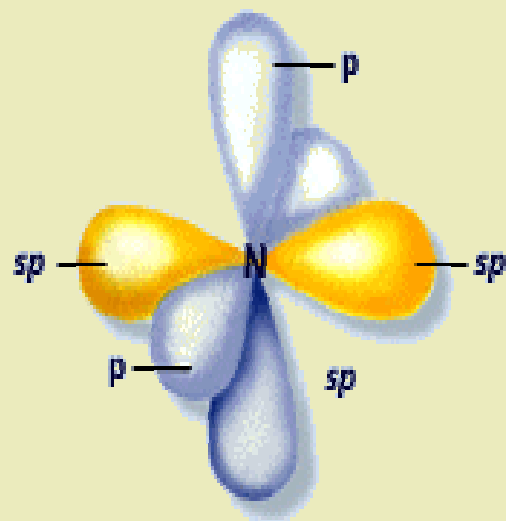


# HIBRIDACIÓN *sp*.



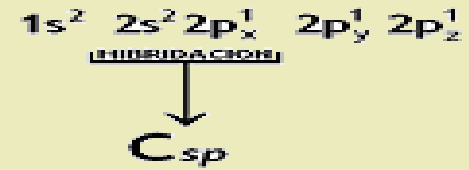
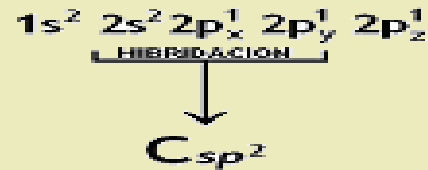
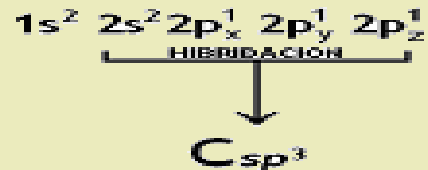
# HIBRIDACIÓN *sp*.

*distribución de enlaces en la molécula N<sub>2</sub>*





# Hibridación de orbitales.



*En la hibridación se combinan:*

*un orb s + tres orb p*

*y se originan:*

*4 orbitales híbridos*  
 $sp^3$

*un orb s + dos orb p*

*3 orbitales híbridos*  
 $sp^2$

*un orb s + un orb p*

*2 orbitales híbridos*  
 $sp$

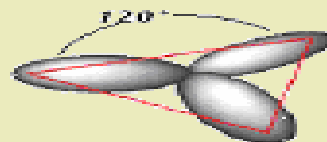
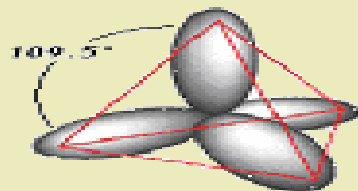
**GEOMETRIA (orientación espacial de los orbitales):**

TETRAEDRICA

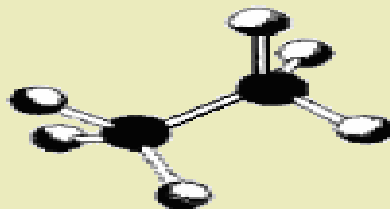
PLANAR

LINEAL

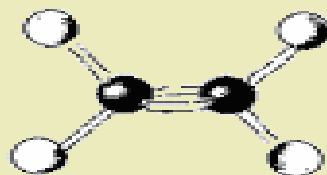
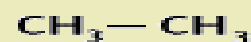
**REPRESENTACION:**



**EJEMPLOS**



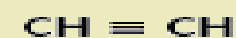
ETANO



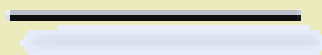
ETENO



ETINO

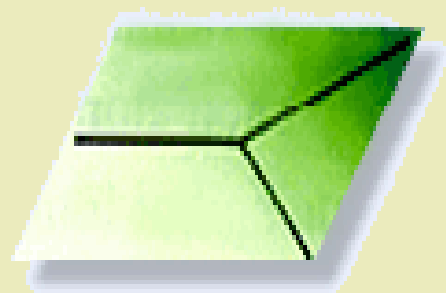


# Resumen de los varios tipos de hibridación.



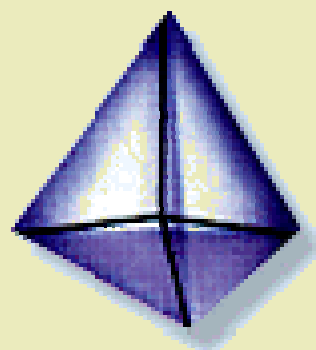
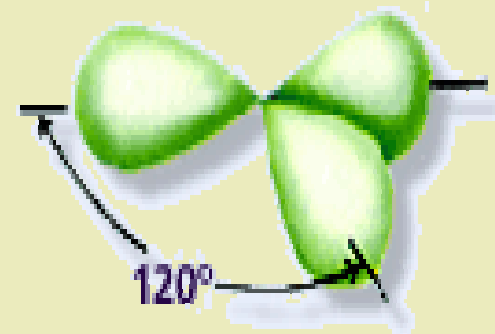
Lineal

$sp$



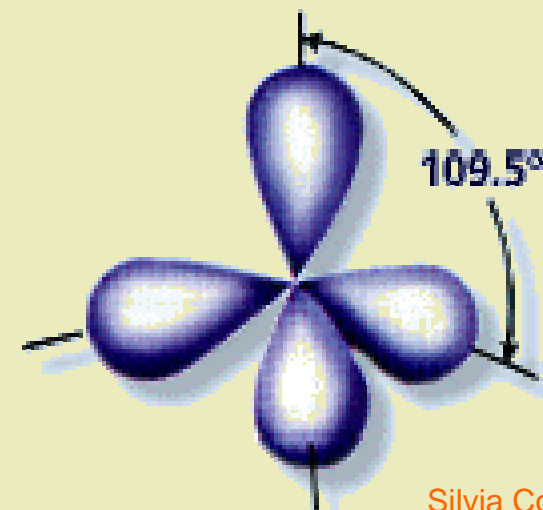
Trigonal  
planar

$sp^2$

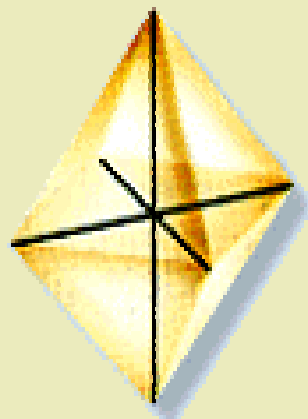


Tetraedra

$sp^3$

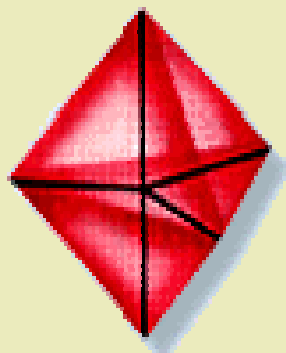
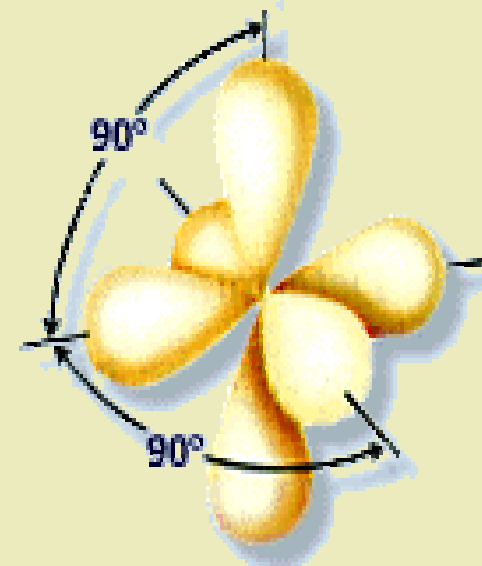


# Resumen de los varios tipos de hibridación



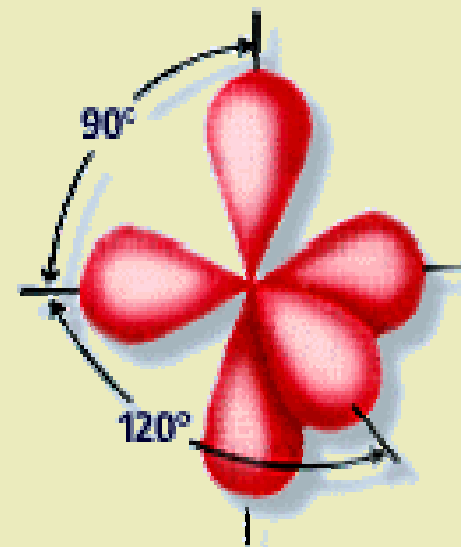
Octaedra

$d^2sp^3$

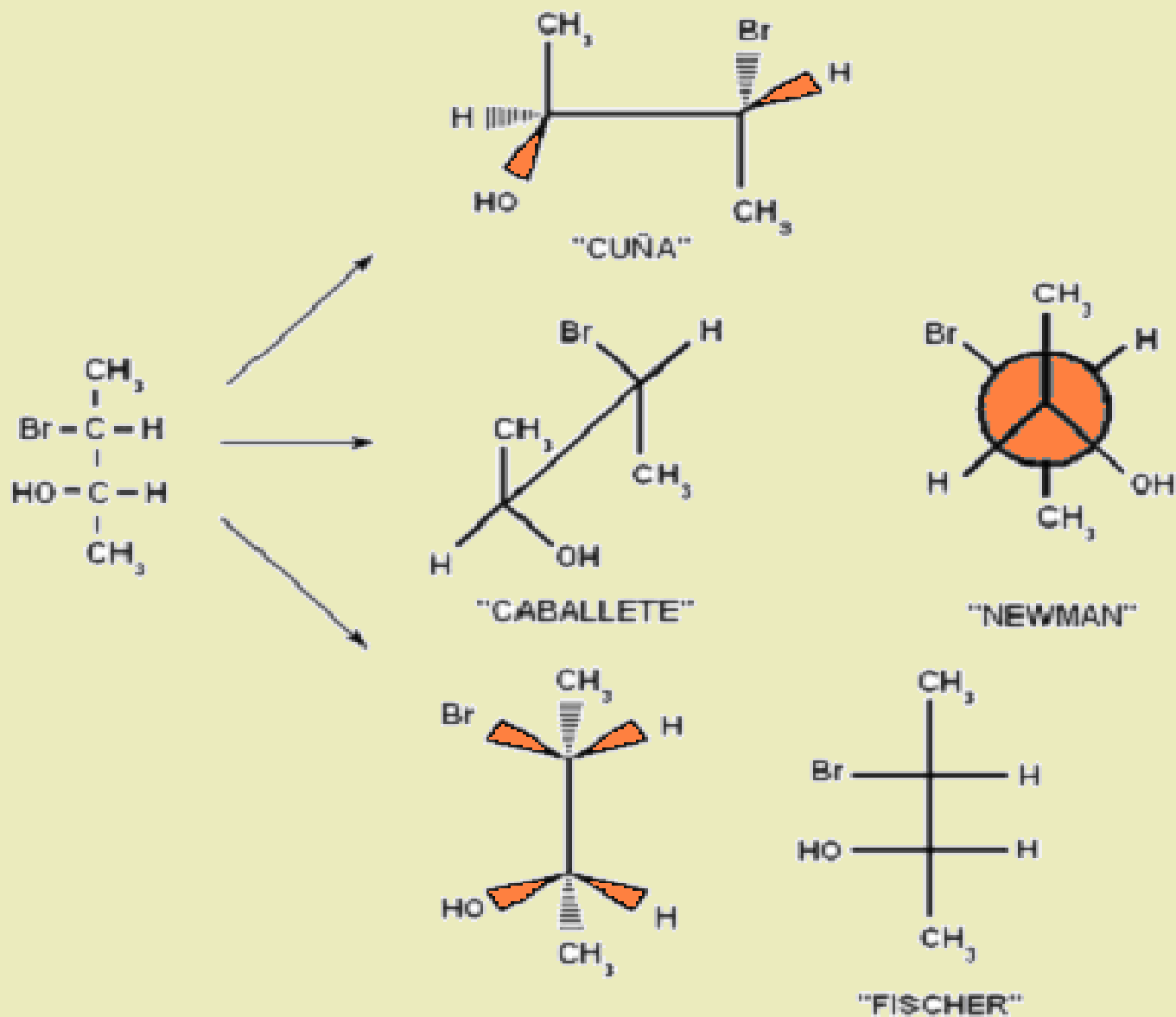


Trigonal  
bipiramidal

$dsp^3$



REPRESENTACIONES TRIDIMENSIONALES

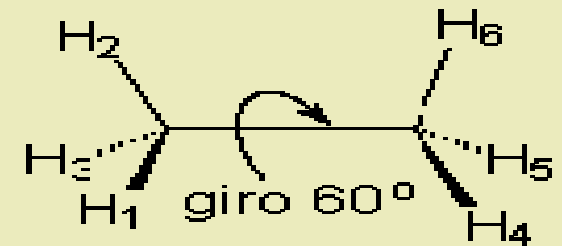
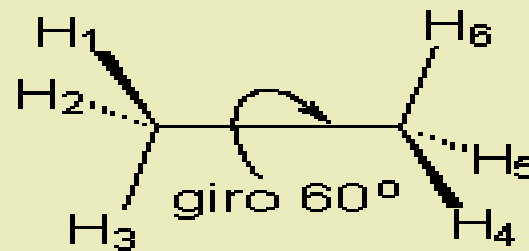


Existen varias formas para representar las conformaciones existentes por la rotación de un enlace simple C – C.

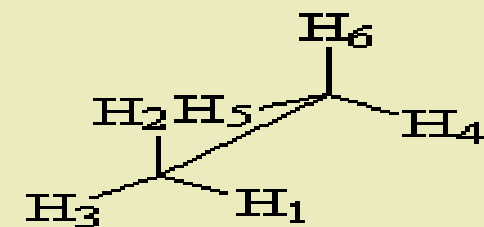
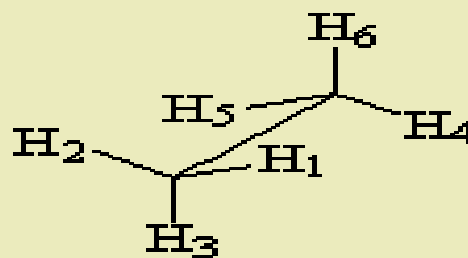
## Alternadas

## Eclipsadas

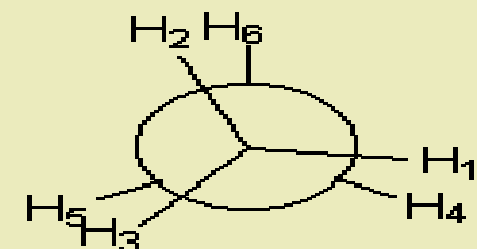
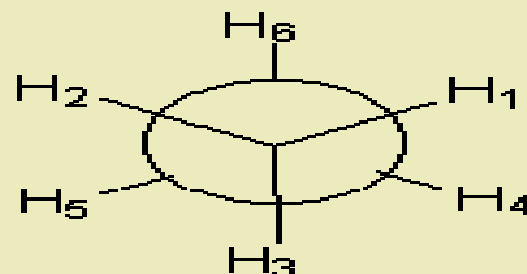
Líneas y cuñas



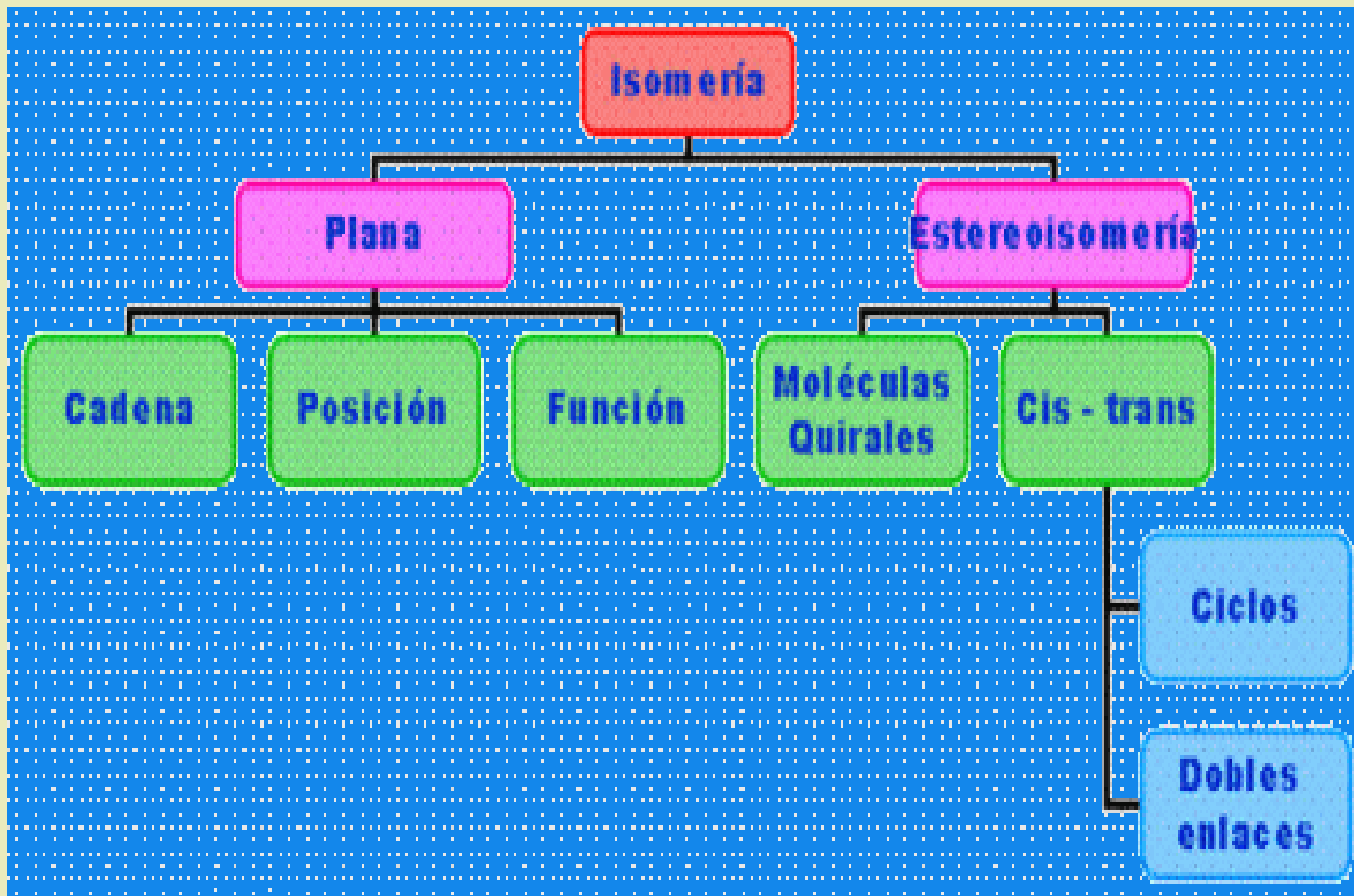
Caballete



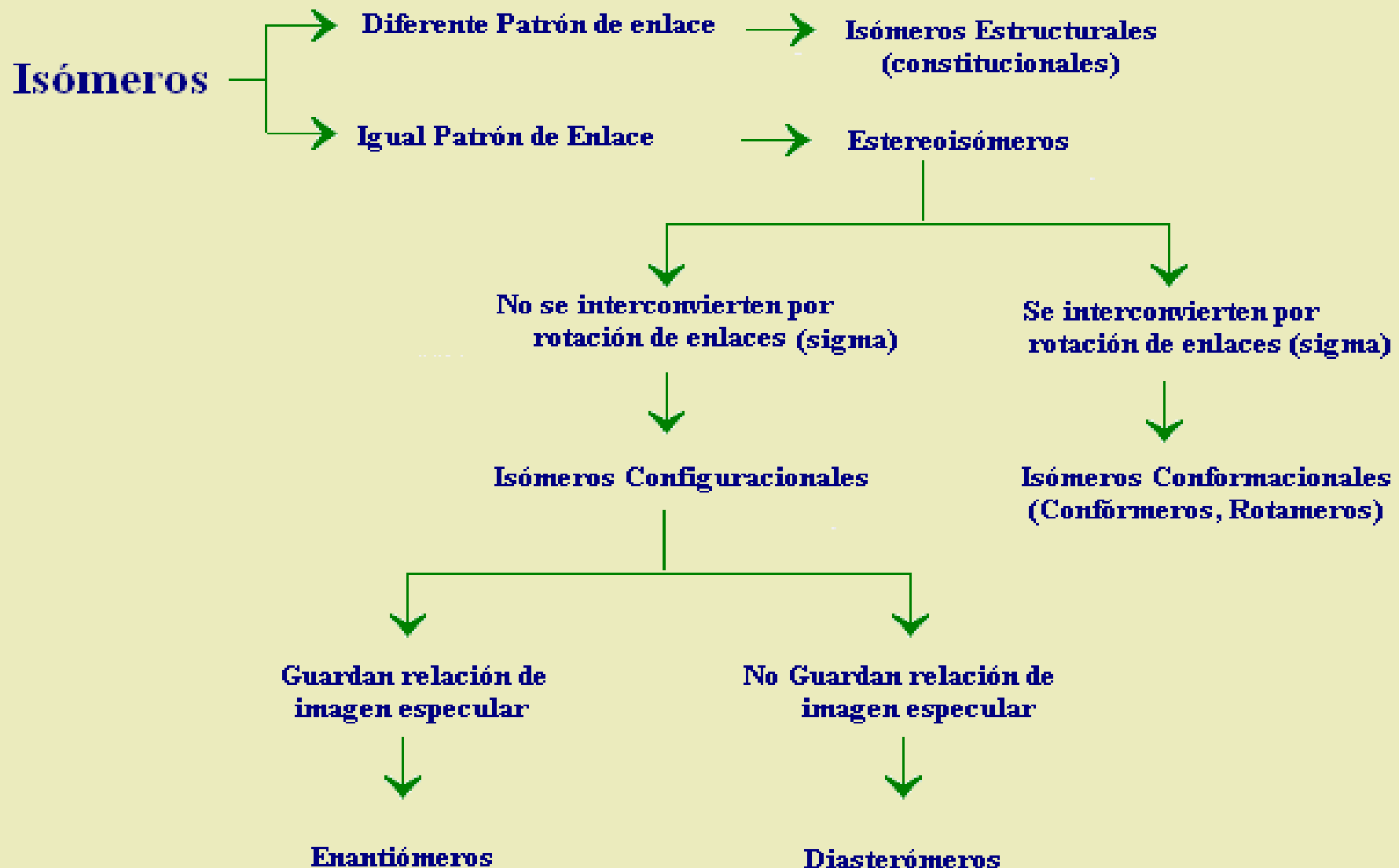
Newman



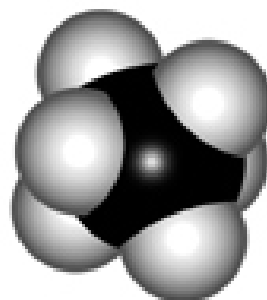
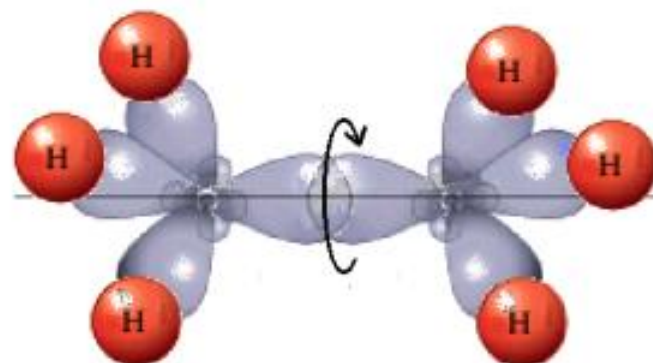
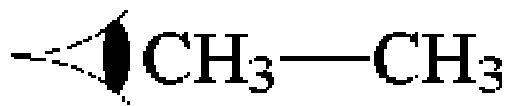
# ISOMERIA.



# Relación entre compuestos isómeros.



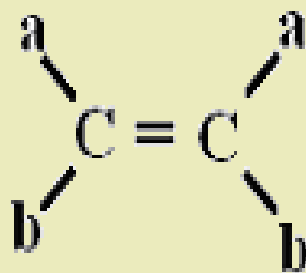
# Análisis Conformacional



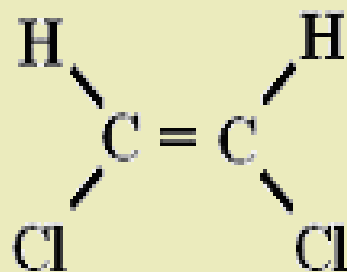
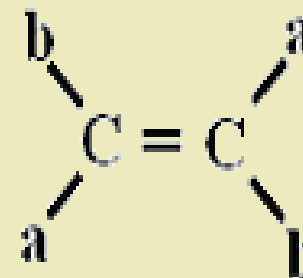


# ISOMERIA.

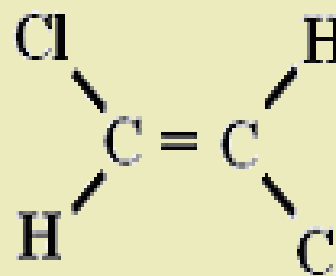
cis -



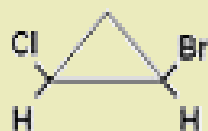
trans -



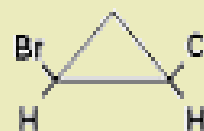
Z - 1,2 - dicloroeteno



E - 1,2 - dicloroeteno



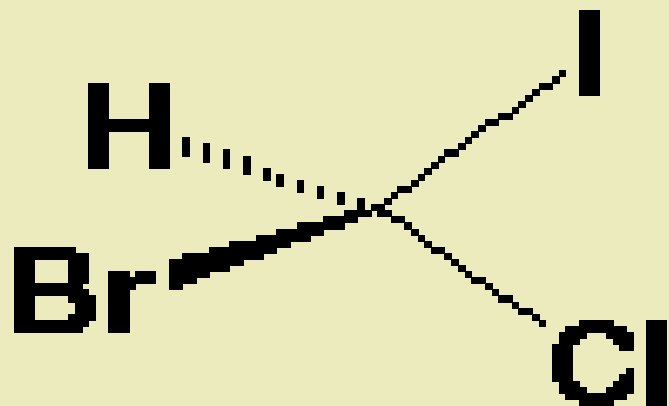
cis - 1 - bromo - 2 - clorociclopropano



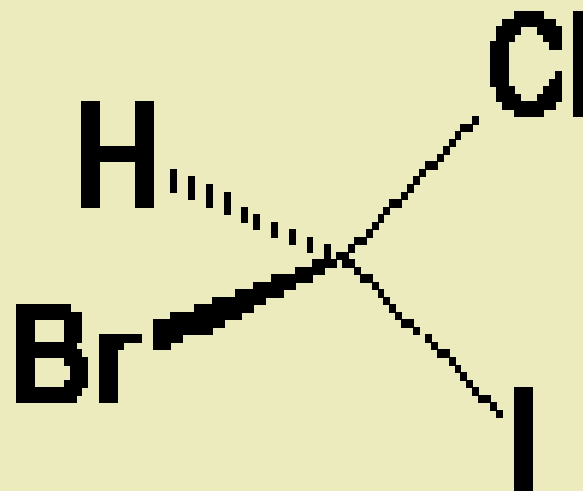
trans - 1 - bromo - 2 - clorociclopropano

## ISOMERIA.

(R)-Bromocloroiodometano



(S)-Bromocloroiodometano



## Reacciones Químicas.

Las reacciones químicas son las transformaciones de la materia que producen cambios en unas sustancias para obtener otras diferentes. En estas transformaciones, se parte de unas sustancias en el estado inicial, llamadas reactivos, y se obtienen otras diferentes en el estado final, llamadas productos.



Reactantes

Productos

Estado  
Inicial

Estado  
Final

## REACCIONES ORGANICAS

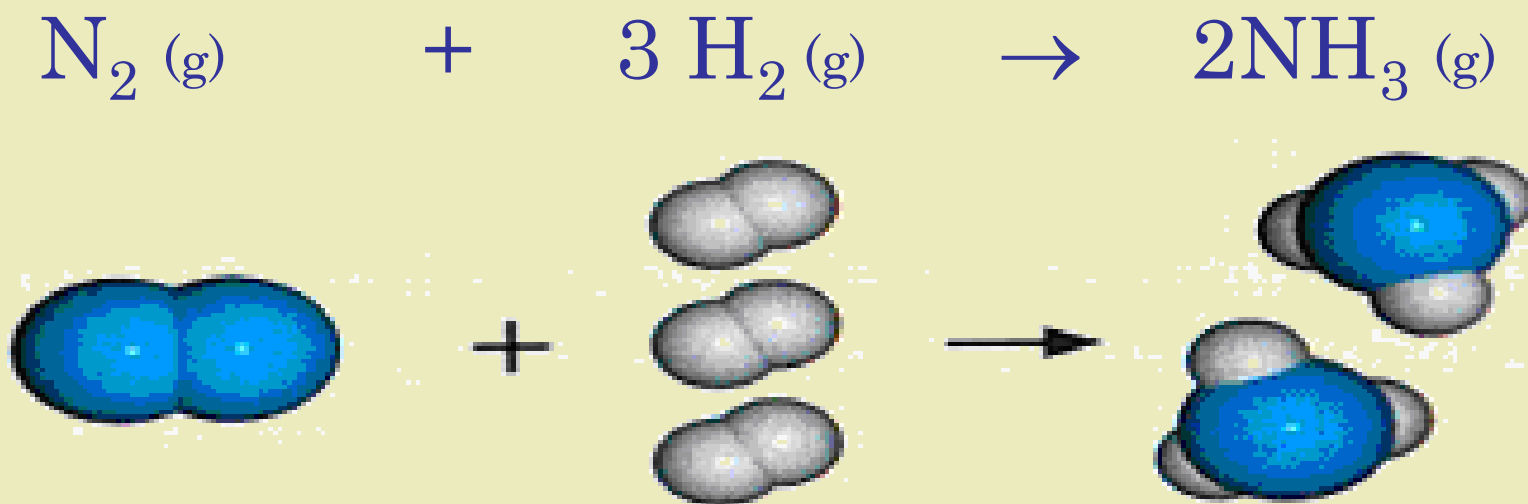
Para que una reacción química tenga lugar es necesario que las sustancias iniciales se encuentren en condiciones favorables.

Un pedazo de carbón no se quema (no produce una reacción química) si está húmedo o si el aire contiene poco oxígeno.



Una *reacción química* es un proceso mediante el cual unas especies se convierten en otras, un proceso en el que tiene lugar una reordenación de los núcleos y de los electrones del sistema.

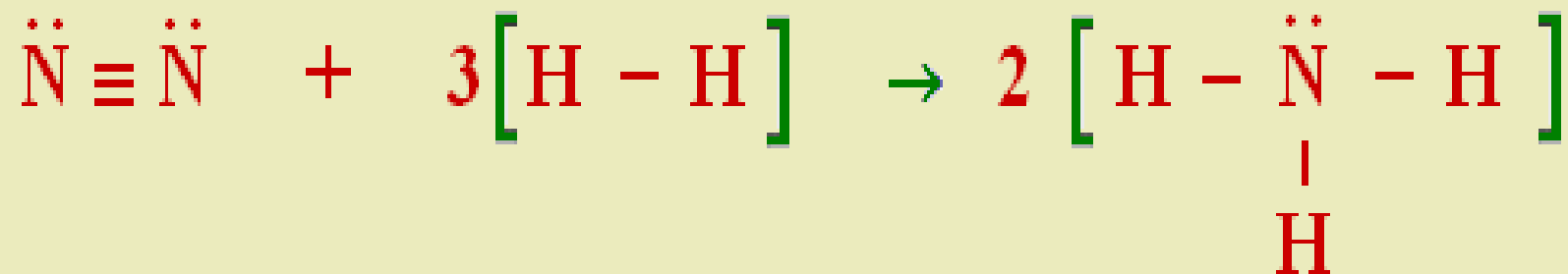
El nitrógeno y el hidrógeno reaccionan para formar amoníaco.



## Para entender una reacción en detalle debe tenerse información acerca de:

- las estructuras de los reactivos y de los productos,
- las condiciones en las que tiene lugar la reacción y
- una descripción detallada de los caminos por los que los núcleos y los electrones cambian de posición, a medida que los reactivos se convierten en los productos.

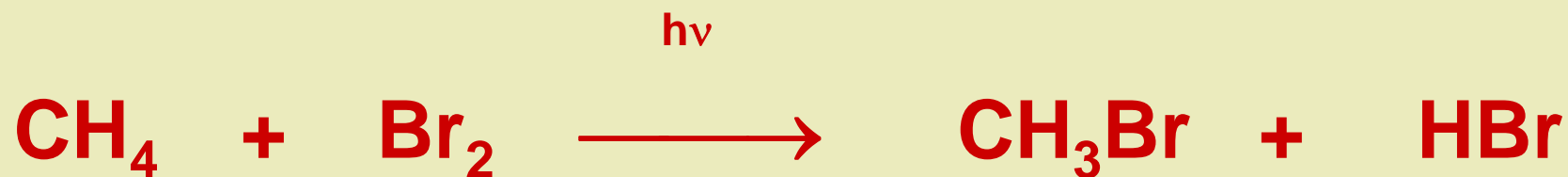
Las *reacciones químicas* son procesos por medio de los cuales una sustancia de una cierta estructura molecular se transforma en otra.



Para determinar:

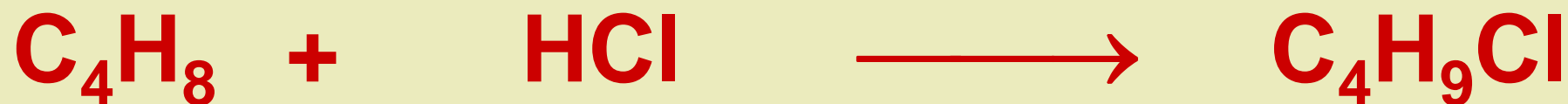
- cuándo se verifica una reacción, se estudian los productos formados en dichas reacciones químicas.
- cómo se verifica una reacción se estudia lo que ocurre cuando un reactante comienza a transformarse en un producto.

Para describir una reacción química se escriben ecuaciones químicas que, por medio de símbolos, indican qué cambios ocurren cuando los reactantes se transforman en productos.



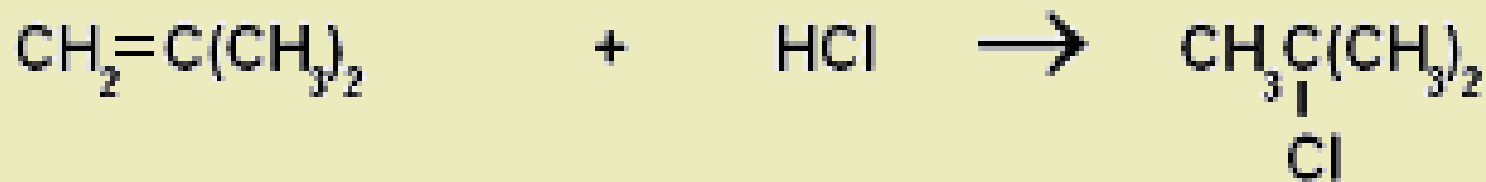
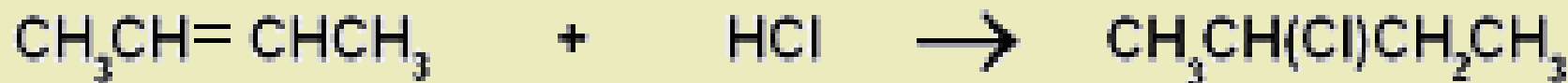
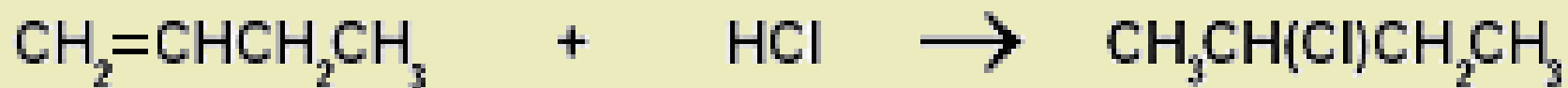
Esta ecuación describe por completo los cambios estructurales que se verifican cuando el metano reacciona con el bromo, en presencia de luz ultravioleta, para formar bromuro de metilo. Esta ecuación contiene toda la información disponible sobre los reactantes y los productos en la reacción de bromación.





Esta ecuación no contiene toda la información disponible sobre los reactantes y los productos, pues solo se indica que el buteno,  $\text{C}_4\text{H}_8$ , reacciona con el cloruro de hidrógeno. No especifica sobre cuál alqueno de cuatro átomos de carbono, ¿el 1-buteno? ó el ¿2-buteno?, ? ó el ¿2-metil-1-propeno?, se esta llevando a cabo la reacción, y en consecuencia también la estructura del producto resulta una incógnita.

Para evitar confusión es necesario tener en cuenta que cuando las fórmulas moleculares de los reactantes o los productos no establecen las diferencias entre los isómeros estructurales, se hace necesario usar fórmulas estructurales para describir las reacciones orgánicas.



En una ecuación química que utilice formulas estructurales, las reacciones químicas muestran el rompimiento y la formación de enlaces covalentes.

En toda reacción química siempre se conservan los átomos, por lo que es necesario escribir las ecuaciones químicas balanceadas.

Si se verifica más de una reacción y se forma más de un producto, una ecuación balanceada no necesariamente describe la reacción completa.

Si la ecuación escrita toma en cuenta todos los reactantes y productos, la ecuación es *estequiométrica*.

Si se forma más de un producto, se indica la importancia relativa de cada posible reacción química mediante el rendimiento porcentual del producto observado.

*El estudio de una reacción química puede hacerse desde el punto de vista: “termodinámico o cinético.”*

La **termodinámica** y la **cinética** son factores importantes para describir el efecto de los diversos componentes energéticos en las reacciones.

La **termodinámica** estudia las energías relativas de los reactivos y los productos, en tanto que

la **cinética** describe la rapidez con la que una reacción avanza.

Para que una reacción sea práctica, la termodinámica debe favorecer el producto deseado y la velocidad de reacción debe ser suficientemente grande, no solo para que la reacción se complete en un tiempo razonable sino además para que predomine sobre las reacciones en competencia.

## Ruptura del enlace covalente. Reacciones heterolíticas y homolíticas.

*Hay dos posibles formas de romper un enlace covalente [ A – B ]:*

- Una ruptura de tipo iónico que implica la formación de dos iones: un catión y un anión, y se conoce como “**ruptura heterolítica**”.

La ruptura heterolítica da lugar a la formación de intermediarios iónicos (carbocationes o carbaniones).

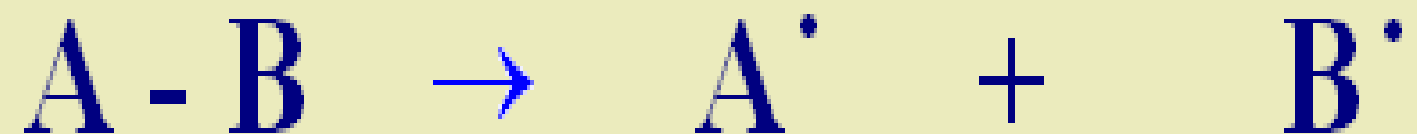
- Una disociación del enlace que da lugar a la formación de dos especies con electrones sin aparear, cada uno de los electrones del enlace covalente queda asociado a cada uno de los átomos que constituían el enlace.

Esta ruptura se conoce como “**ruptura homolítica**”.

La energía necesaria para romper el enlace de forma homolítica se conoce como **Energía de disociación de enlace**.

La ruptura homolítica da lugar a la formación de intermediarios neutros (radicales libres).

# Ruptura heterolíticas y homolíticas.





Una reacción en la que se produzca tanto una ruptura como una formación de enlaces, tiene dos posibilidades límite:

- la ruptura y *la* formación de enlaces ocurren de manera simultánea,
- o bien la ruptura de enlaces se presenta antes de la formación de enlaces.

Cuando la ruptura y la formación son simultáneas en el estado de transición se rompe un enlace y se forma otro al mismo tiempo,



*REACTANTES*

*COMPLEJO ACTIVADO*

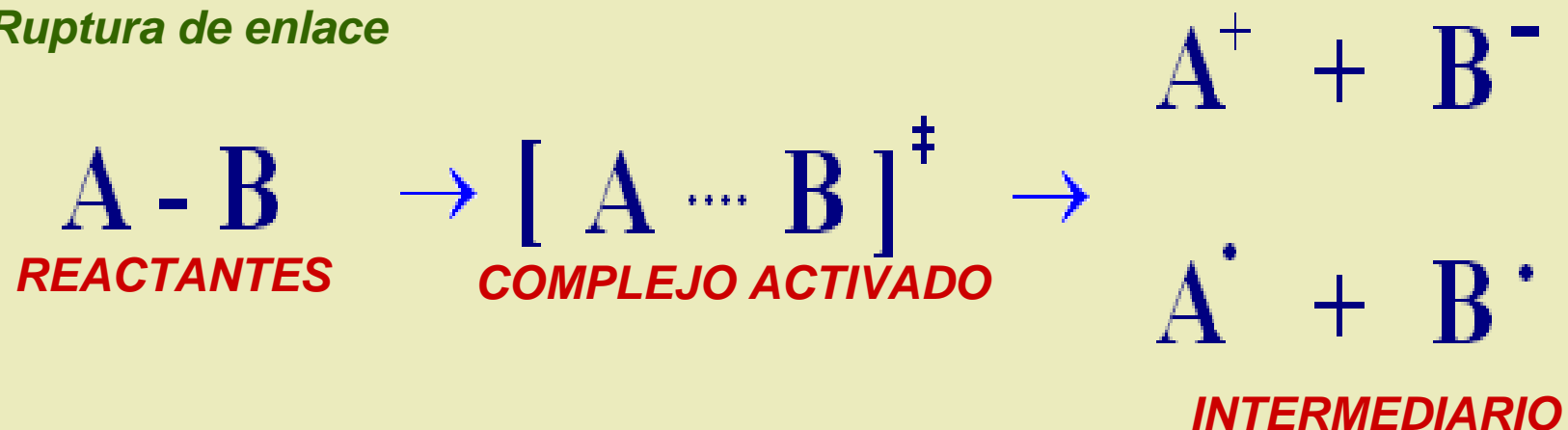
*PRODUCTOS*

Por otra parte, si la ruptura y la formación de enlaces no son simultáneas, *se forma un “intermediario”* que puede ser iónico (ruptura heterolítica) o poseer un electrón sin aparear (ruptura homolítica). Este proceso consta de dos etapas definidas:

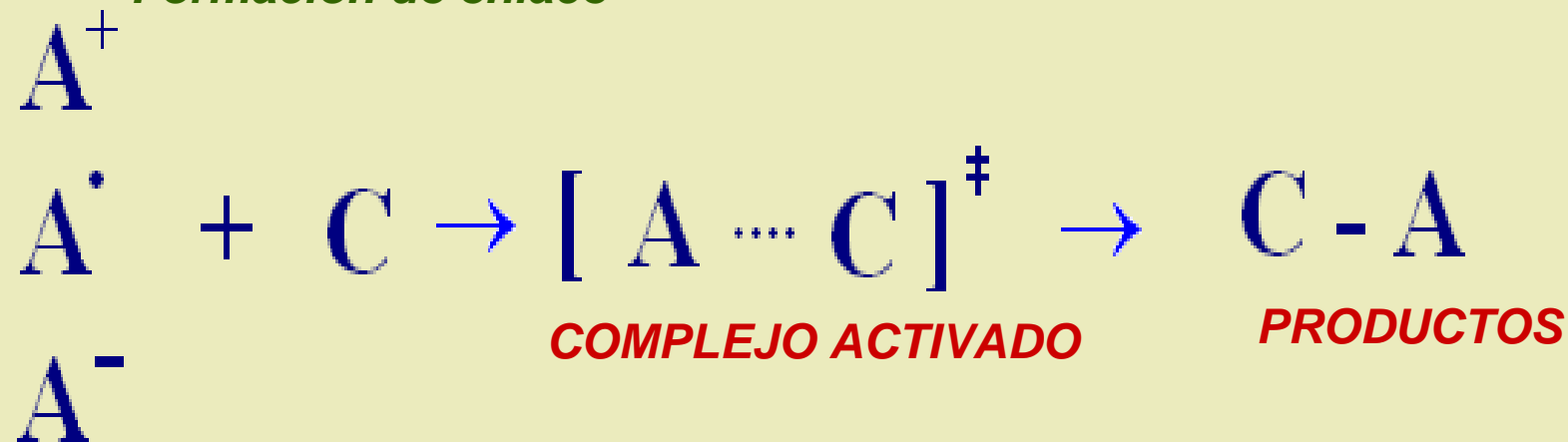
- formación de un intermediario por ruptura de enlaces, y
- formación del producto o productos por formación de enlaces covalentes:

# Ruptura y formación de enlaces.

*Ruptura de enlace*



*Formación de enlace*

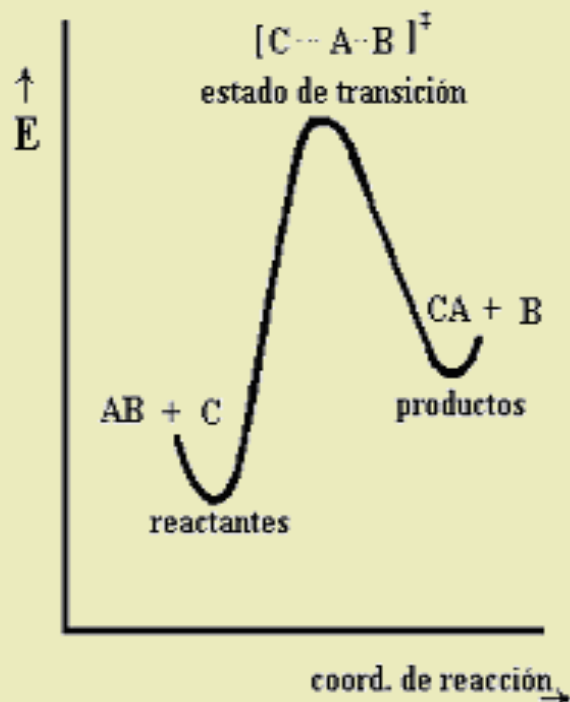


*Diagramas de energía para:*

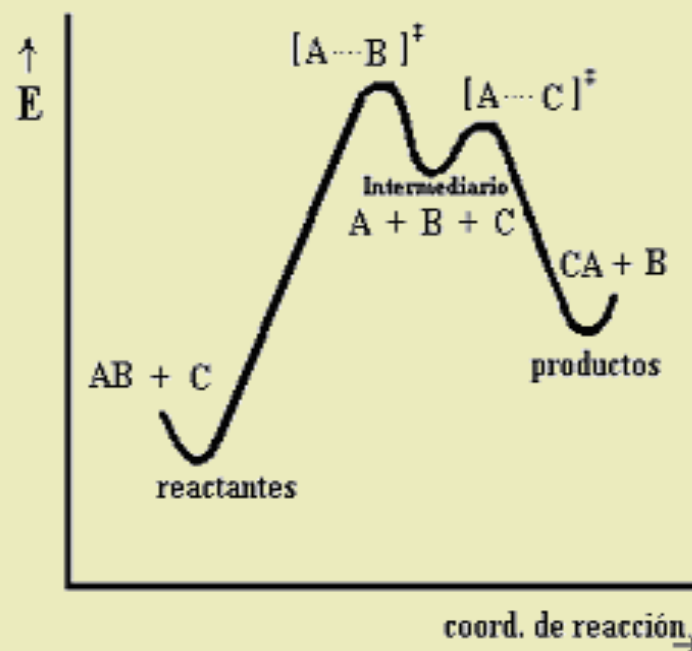
*(a) Procesos concertados ( una sola etapa);*

*(b) Procesos en etapas. La mayoría de las reacciones en química orgánica se dan en varias etapas.*

Reacción concertada

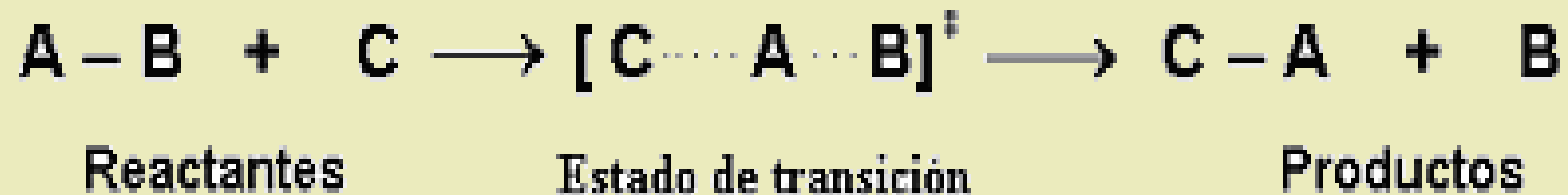


Reacción por etapas



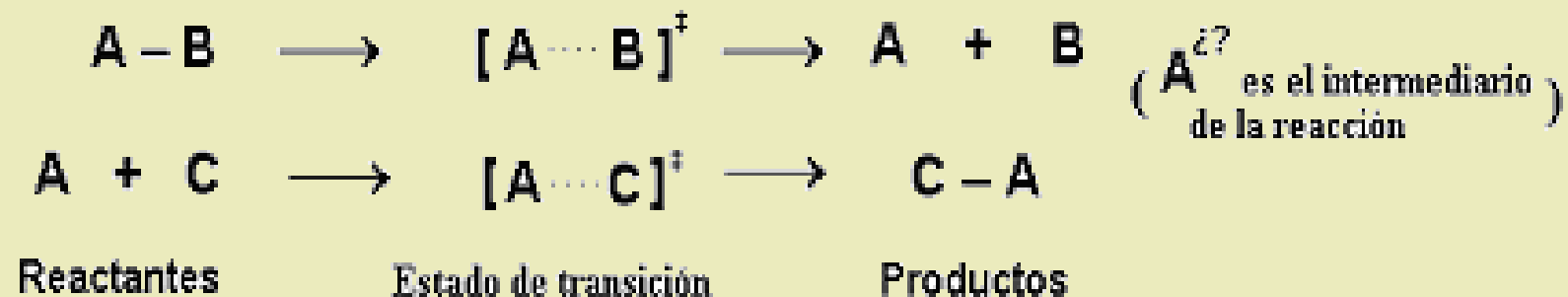
## *Procesos concertados.*

Ruptura y formación simultánea de enlaces



## *Procesos en etapas.*

Ruptura y formación de enlaces por etapas. Ruptura de enlaces (heterolítica u homolítica)



Por regla general:

➤ las reacciones heterolíticas (iónicas) se efectúan en condiciones polares;

➤ las reacciones homolíticas (radicales libres) se efectúan en condiciones no polares.

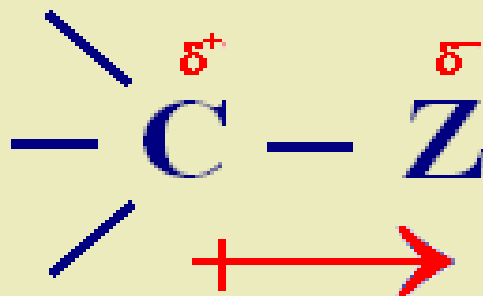
## Las reacciones polares:

- se llevan a cabo en solventes polares, como agua o alcohol,
- casi siempre requieren de la presencia de un catalizador ácido o básico,
- los reactantes pueden tener carácter iónico o formar productos iónicos.

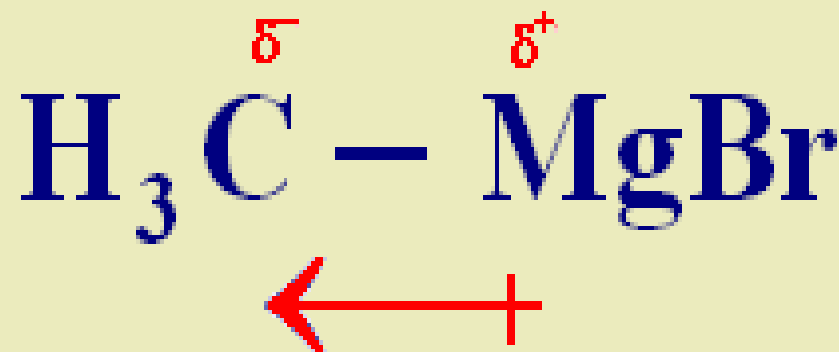


- Una reacción procede en condiciones polares, si hay presentes **enlaces polares** en la molécula.
- La mayoría de las moléculas son eléctricamente neutras; sin embargo, ciertos enlaces dentro de la molécula, particularmente los enlaces en **los grupos funcionales**, frecuentemente son polares.
- La polaridad del enlace es una consecuencia de la **distribución asimétrica de la densidad electrónica en el enlace**, y es debida a la electronegatividad intrínseca de los átomos implicados.

Un átomo de **C** *enlazado a átomos más electronegativos* (O, N, F, Cl, y Br) adquiere una carga parcial positiva ( $\delta^+$ ) y el átomo electronegativo una carga parcial negativa ( $\delta^-$ ).

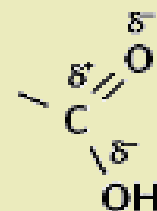
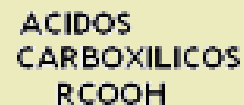
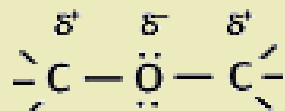
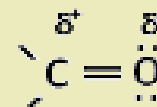
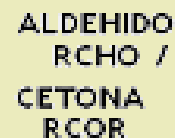
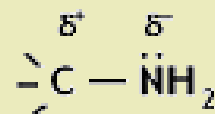
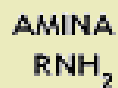
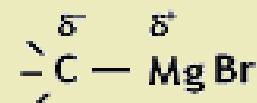
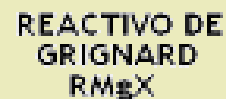
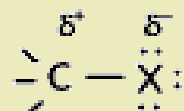
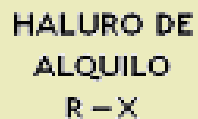
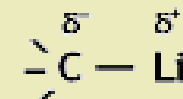
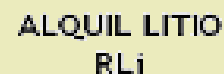
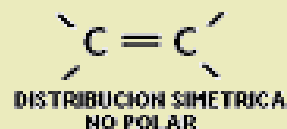
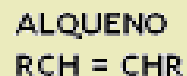
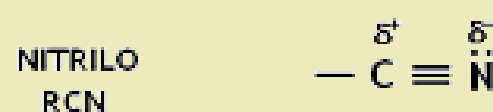
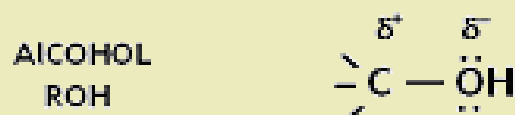


El átomo de carbono también puede formar enlaces con átomos menos electronegativos, como es el caso de enlaces **C – Metal**, dónde el átomo de carbono esta negativamente polarizado con respecto al metal.

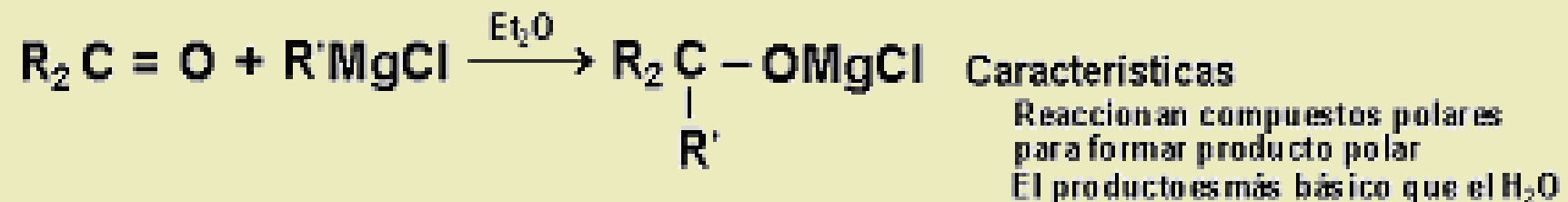
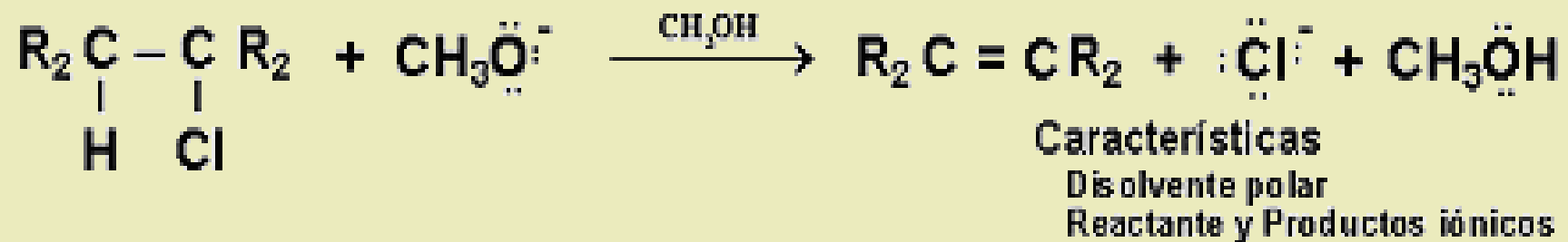
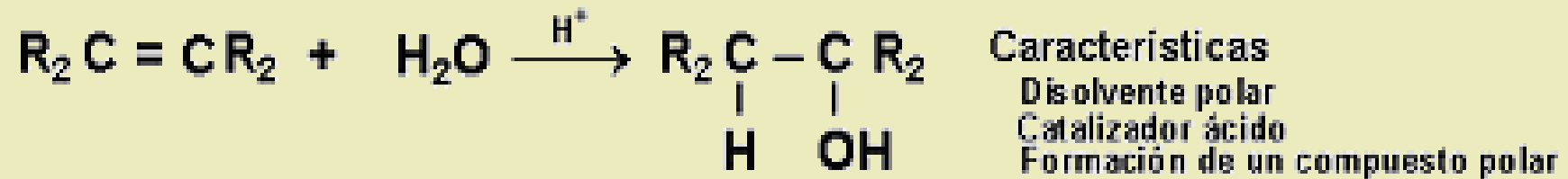


# POLARIDAD DE ALGUNOS GRUPOS FUNCIONALES.

**COMPUESTO GRUPO FUNCIONAL COMPUESTO GRUPO FUNCIONAL**



*Algunas reacciones polares.*

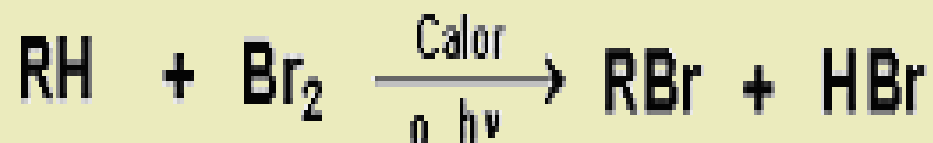


Las *reacciones no polares* se llevan a cabo con **disolventes no polares** como los hidrocarburos o sin disolvente.

Por lo general, se inician con calor en vez de ser catalizadas por ácidos o bases.

Aunque una reacción no polar puede involucrar la reacción o la formación de un compuesto polar, casi siempre sucede que los productos y los reactantes son moléculas no polares.

*Algunas reacciones no polares:*



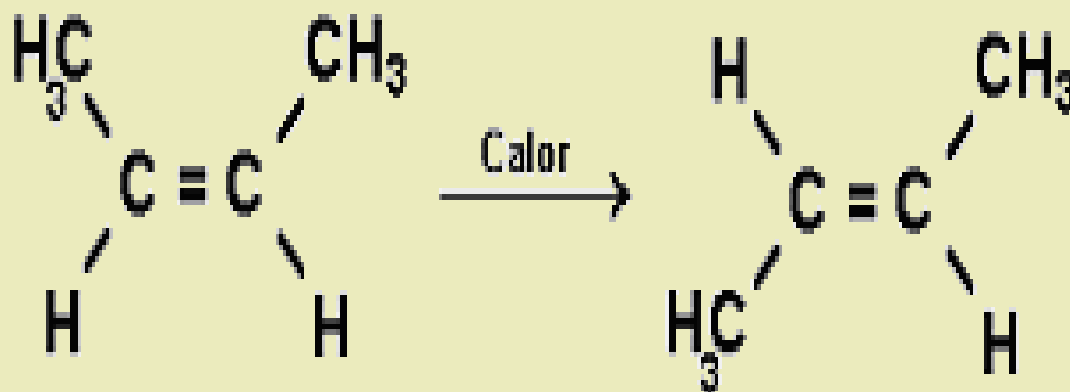
Características

No hay disolvente  
Requiere luz ó calor



Características

Reaccion entre moléculas no polares  
para formar un producto no polar



Características

Requiere calor  
No hay disolvente

# *Características experimentales de la reacciones:*

## *Iónicas*

1. Tienen lugar en solución (solventes polares) y solo muy raramente en fase gaseosa.
2. Se producen en disolventes polares. La polaridad del disolvente influye en las reacciones.
3. Son catalizadas por ácidos y bases.
4. Las velocidades de reacción aumentan al aumentar la temperatura, pero no se afectan por la luz, sustancias productoras de radicales libres o inhibidores de radicales libres.
5. Normalmente no son autocatalíticas, esto es, las velocidades de reacción son uniformes y regulares durante todo el transcurso de la reacción.

## *Radicales Libres.*

1. Tienen lugar en fase gaseosa o en disolventes no polares.
2. Son catalizadas por la luz y por sustancias que se sabe se descomponen con formación de radicales libres (peróxidos).
3. Muchas solo transcurren a temperaturas elevadas.
4. Las velocidades de reacción no varían demasiado al variar la temperatura. Las velocidades de las reacciones en fase gaseosa están influidas por la forma y tamaño de la vasija de reacción.
5. Las reacciones se inhiben o previenen por la presencia de "atrapadores" de radicales libres ( por ejemplo: la hidroquinona).
6. A menudo, las reacciones son autocatalíticas, mostrando un periodo de inducción característico y transcurriendo a velocidad creciente una vez iniciada.

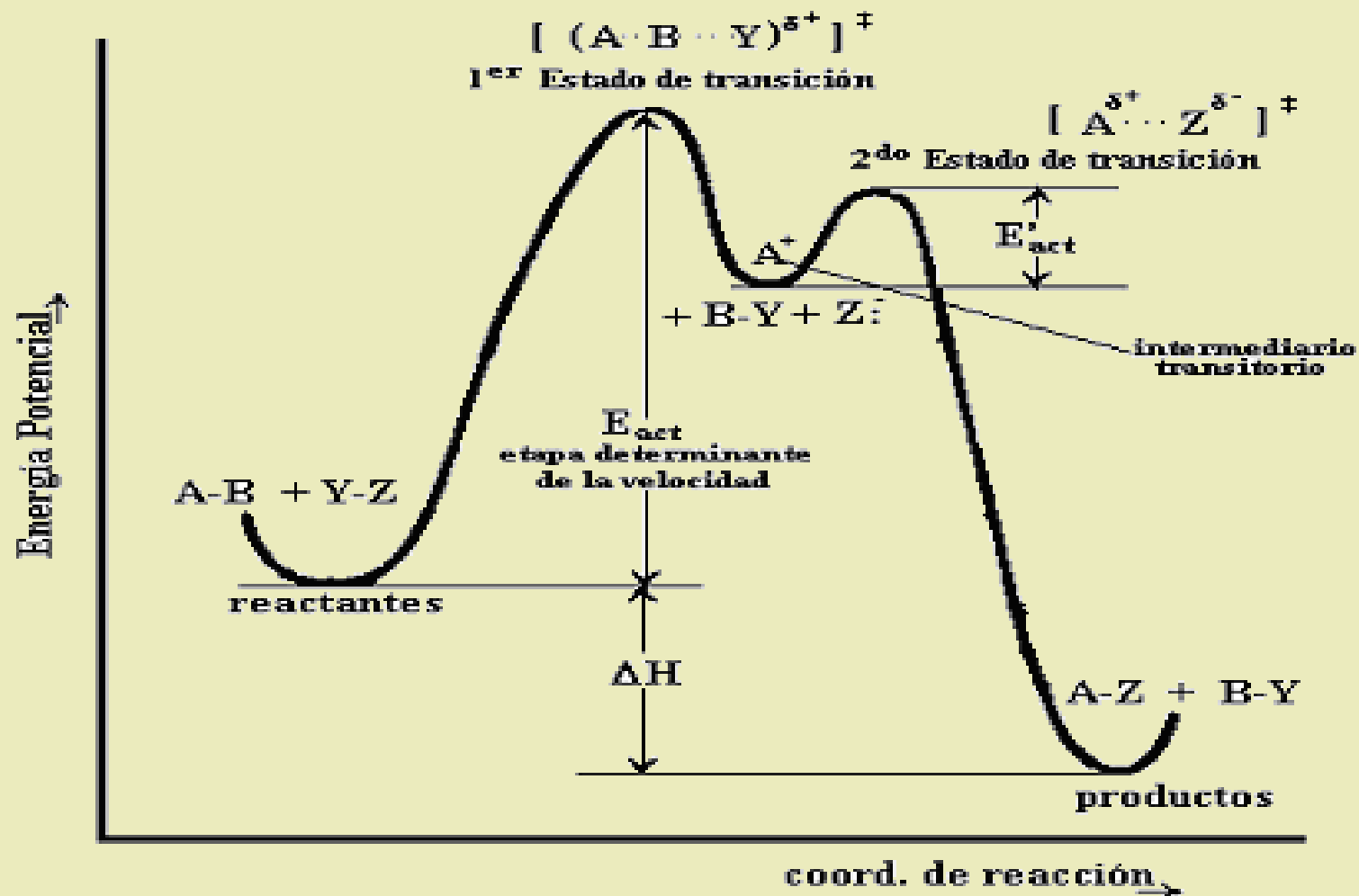


## *INTERMEDIARIOS DE REACCION.*

Los intermediarios de reacción son especies químicas de vida corta y muy reactivas, presentes en el medio de reacción en muy bajas concentraciones porque reaccionan tan rápidamente como se forman.

Cuando se pueden formar varios intermediarios de reacción el más estable será el que controle la velocidad de reacción y los productos de la reacción.

# Intermediarios.



*Tipos de intermediarios:*

*radicales libres,*

*iones carbonio (o carbocationes)*

*carbaniones.*

*y carbenos*

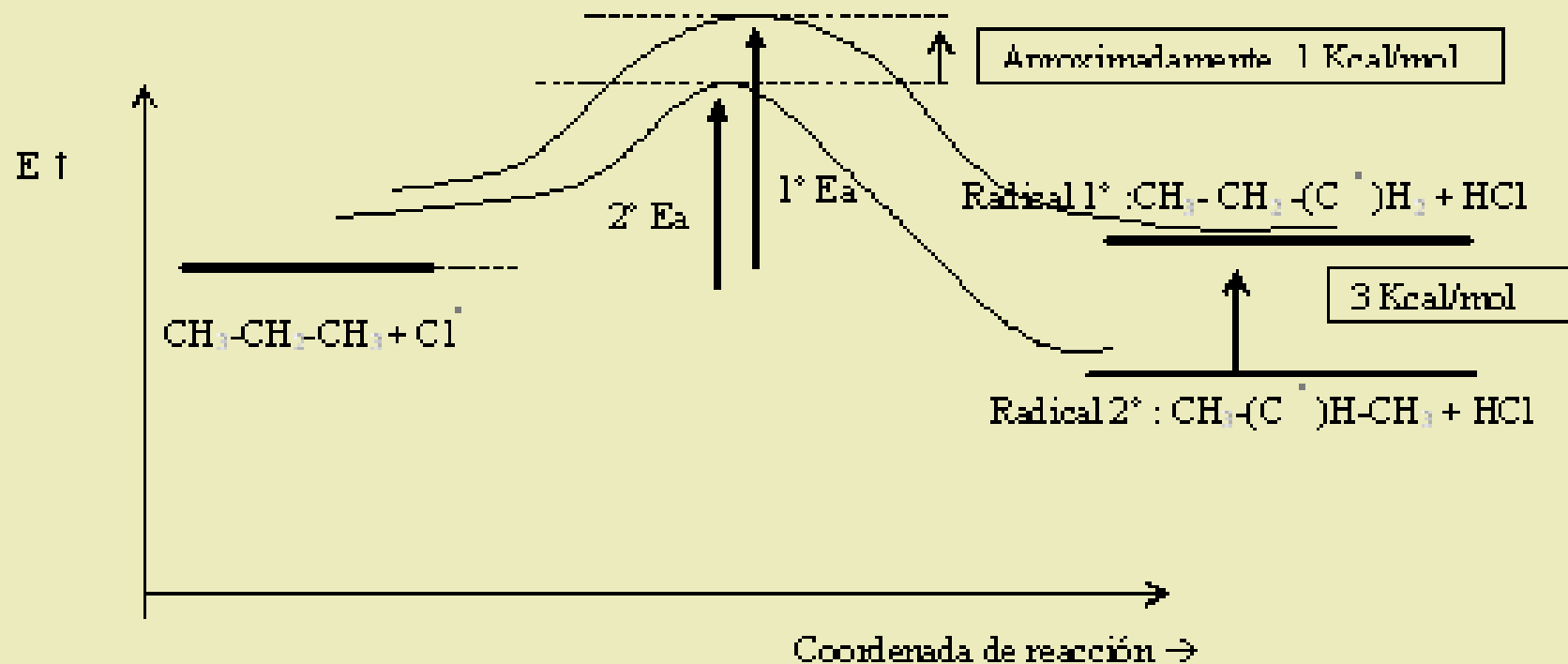
A partir del estudio de los productos obtenidos en diversas reacciones orgánicas, se proponen los posibles **intermediarios de reacción** que han podido intervenir, se compara su **estabilidad** y se explica ésta gracias a la aplicación de conceptos como:

**el efecto inductivo**

**la resonancia**

**la hiperconjugación**

Conocida la estabilidad de los diferentes intermediarios de reacción, se pueden predecir los productos de reacción que se formarán en las reacciones químicas orgánicas.



Perfil de energía. 1º paso de propagación en la reacción de cloración del propano.

## *Radicales libres.*

Los **radicales libres** son los productos del rompimiento homolítico que se producen por acción térmica o fotoquímica (irradiación con luz de una longitud de onda adecuada), tienen uno o más electrones sin aparear y son especies sin carga.

resentan un carbono con geometría electrónica plana triangular y ángulos de enlace de  $120^\circ$ . Según la Teoría del Enlace de Valencia el C presentaría una hibridación  $sp^2$ .

Los radicales libres siempre tienen un número impar de electrones. Son especies deficientes en electrones, electrófilos, que tienen tendencia a completar su octeto aceptando un electrón de otro átomo mediante la formación de un enlace.

Estabilización por efecto inductivo. La falta de un electrón hace que los grupos alquilo los estabilicen por efecto de donación de electrones, siendo el más estable el radical más sustituido.

$3^\circ > 2^\circ > 1^\circ > \text{metilo}$

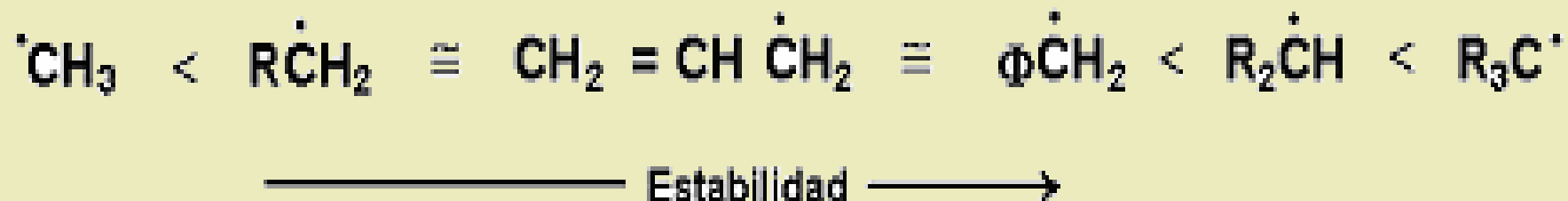
$\text{R}_3\text{C}\cdot > \text{R}_2\text{C}\cdot\text{H} > \text{RC}\cdot\text{H}_2 > \text{C}\cdot\text{H}_3$

Más estable

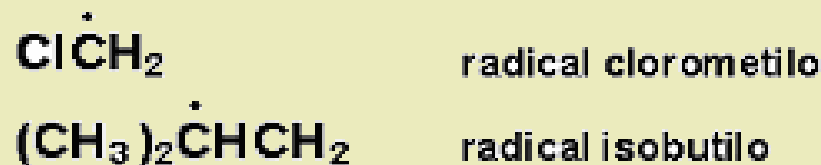
Menos  
estable



## Estabilización por resonancia



Para nombrar los radicales se usa el prefijo radical y se les da el nombre del resto carbonado del cual surgieron:



La estabilidad relativa de los radicales libres depende de su estructura, mientras más sustituido es un radical, mayor es su estabilidad y tanto más rápidamente se genera.



Terciario (3°)



Secundario (2°)

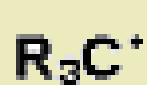


Primario (1°)



Metilo

# REACCIONES ORGANICAS



Terciario (3°)



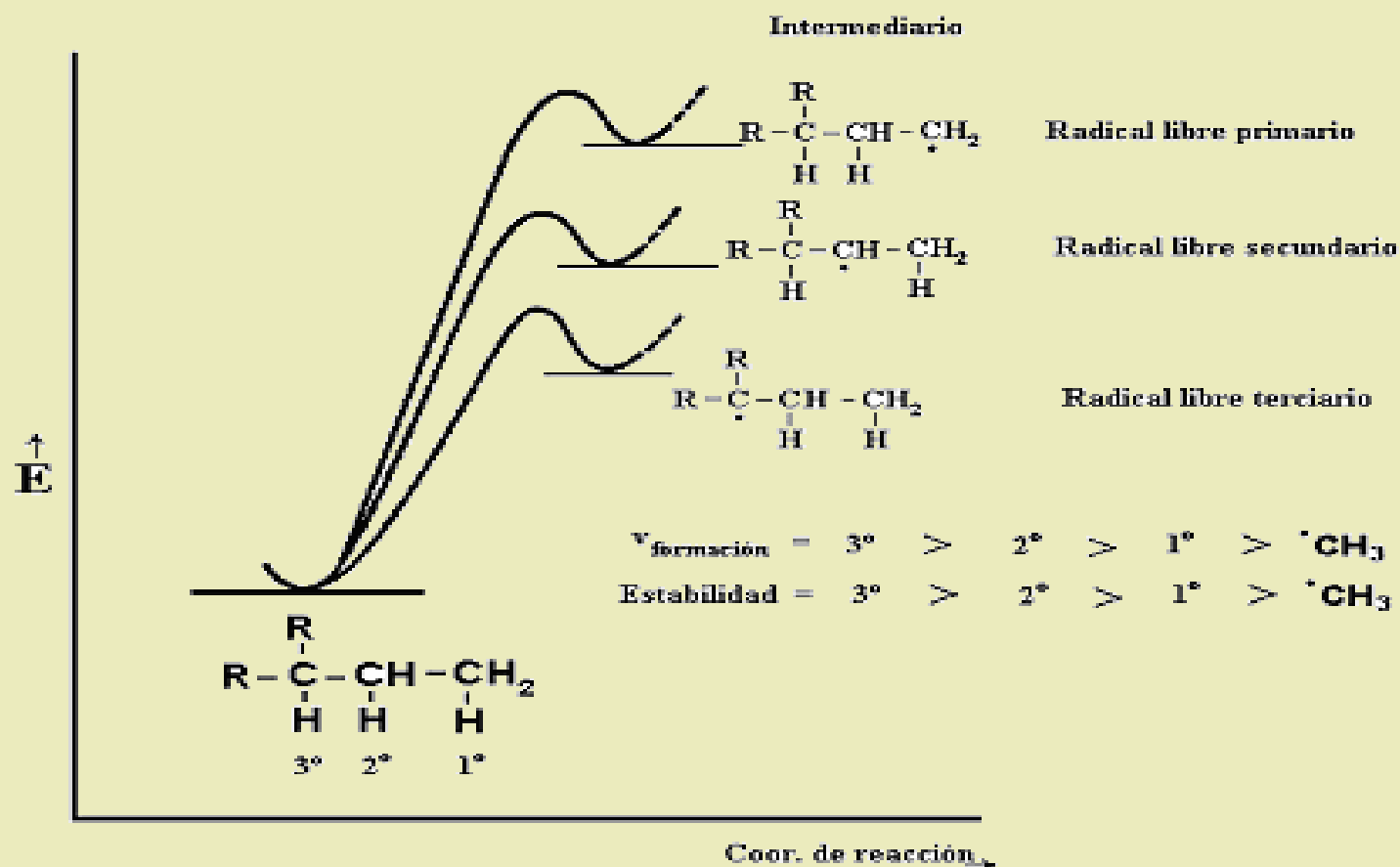
Secundario (2°)



Primario (1°)



Metilo



# CUADRO RESUMEN de INTERMEDIOS DE REACCIÓN

	CARBOCATION	RADICAL LIBRE	CARBANION
<b>ESTRUCTURA</b>	C +	C •	C -
<b>GEOMETRÍA ELECT.</b>	Plana triangular	Plana triangular	Tetraédrica
<b>HIBRIDACIÓN DE C</b>	sp <sup>2</sup>	sp <sup>2</sup>	sp <sup>3</sup>
<b>ESTABILIZACIÓN</b>	Efecto inductivo Hiperconjugación Resonancia	Efecto inductivo Resonancia	Efecto inductivo Resonancia
<b>ESTABILIDAD(en general)</b>	3° > 2° > 1° > CH <sub>3</sub> <sup>+</sup>	3° > 2° > 1° > CH <sub>3</sub> •	CH <sub>3</sub> <sup>-</sup> > 1° > 2° > 3°
<b>CARÁCTER</b>			
<b>ELEC./NUCLEOFILO</b>	electrófilo	electrófilo	nucleófilo

# REACCIONES ORGANICAS

# REACCIONES ORGANICAS

## GEOMETRIA MOLECULAR.

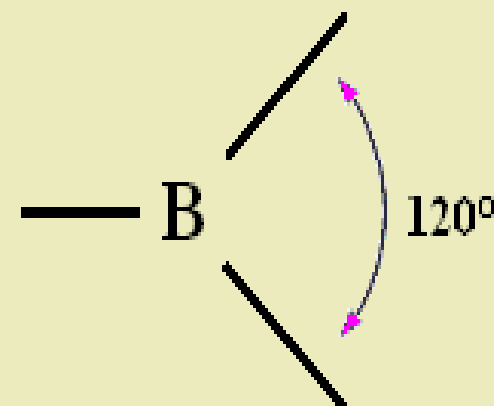
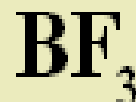
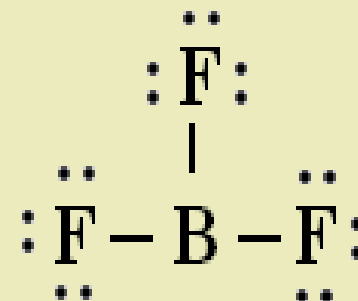
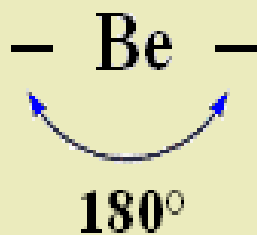
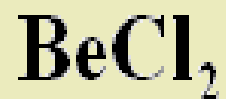
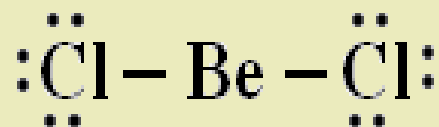
*La geometría alrededor de un átomo central dado de una molécula, es aquella que hace mínima la repulsión de los pares de electrones, los usados para formar enlaces y los no usados que quedan como pares libres alrededor de cada átomo en la molécula.*

## GEOMETRIA MOLECULAR.

*Este principio considera la estructura electrónica de las moléculas en base a la configuración de octetos. Así, lo primero es hacer un balance electrónico de la molécula en base a octetos, luego decidir cual átomo se considera central para luego analizar que pasa con los pares de electrones alrededor de éste. Estos pares, ubicados alrededor de un átomo que se considere central, deben situarse de manera que la repulsión electrostática entre dos pares, sea mínima.*

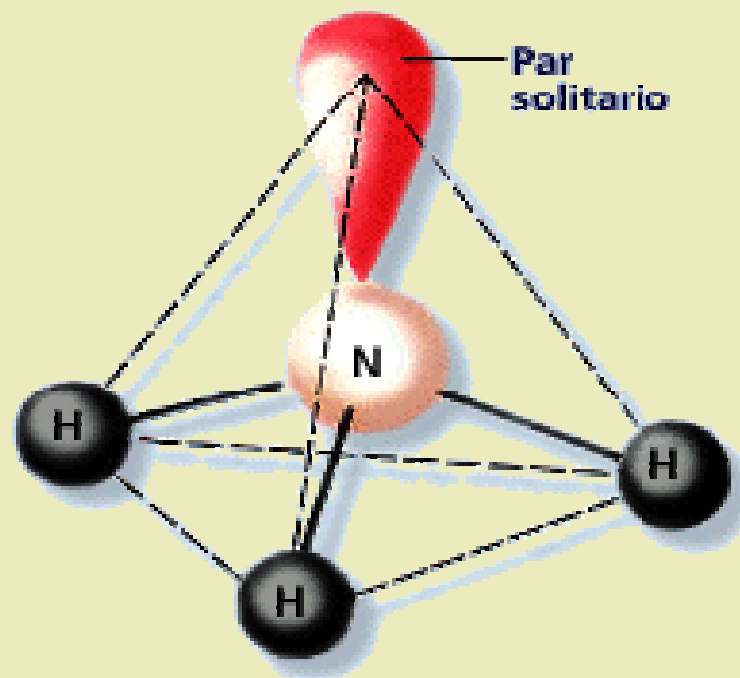
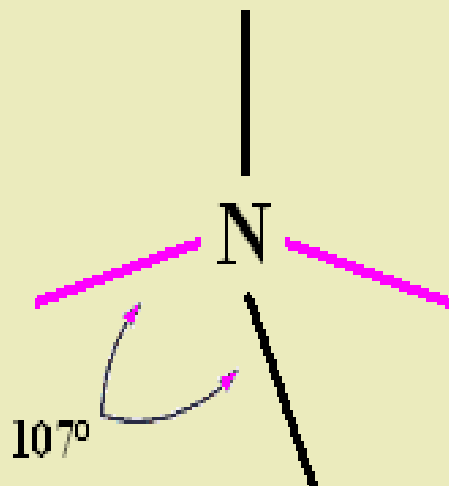
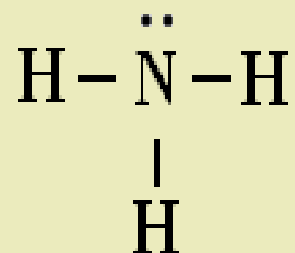


## GEOMETRIA MOLECULAR.







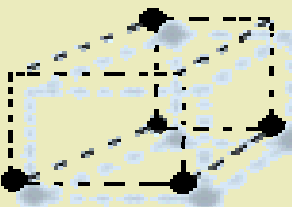
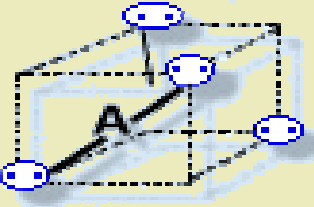

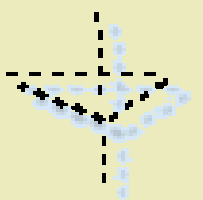
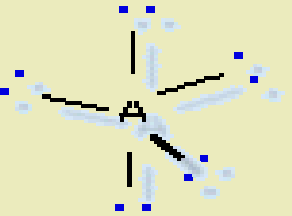

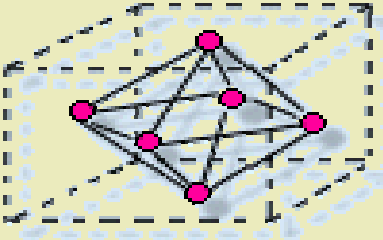
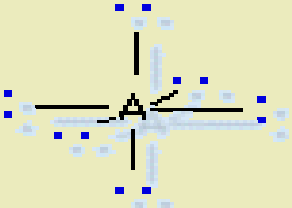



# GEOMETRIA MOLECULAR.

Amoníaco,  $\text{NH}_3$



# GEOMETRIA MOLECULAR.

Cantidad pares de e <sup>-</sup>	Forma molecular	Geometria	Molécula
2	Lineal		 
3	Plana Trigonal		 
4	Tetaédrica		 
5	Bipirámide Trigonal		 
6	Octaédrica		 

El **modelo** sobre repulsión de pares de electrones localizados, **VSEPR** nos enseñó que:

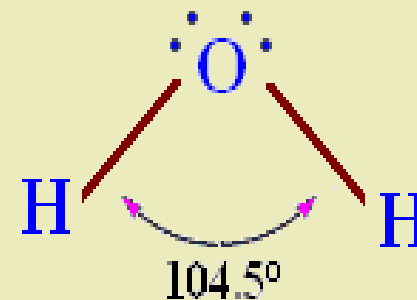
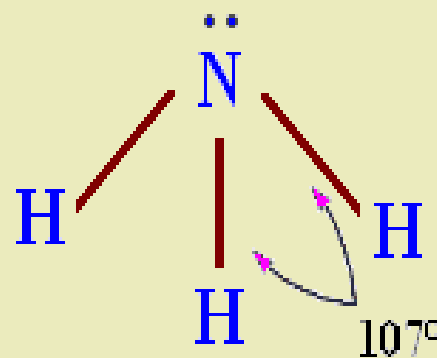
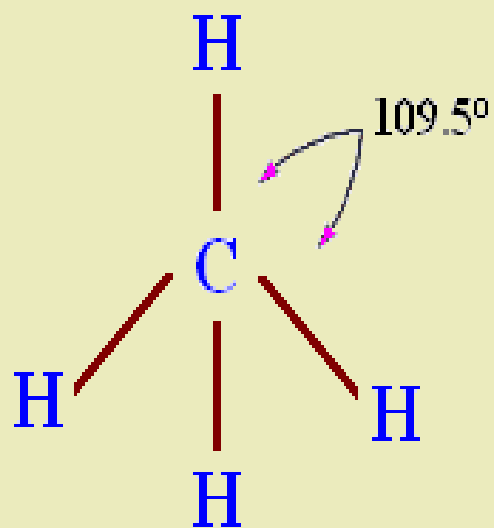
La Molécula es una colección de átomos unidos entre sí por pares de electrones compartidos, los que provienen de los Orbitales Atómicos locales dentro de la capa de valencia de cada átomo. Esto nos permitió predecir la geometría molecular. Ahora nos dedicaremos a describir la manera que estos orbitales atómicos son utilizados para formar los enlaces y los sitios en que residen los pares solitarios no ocupados.

## GEOMETRIA MOLECULAR.

Moléculas que poseen un átomo central con 4 pares electrónicos de los cuales, el metano los ocupa totalmente y las otras en forma parcial.

Lo que se logra es y se ve claramente que la existencia de pares electrónicos libres disminuyen el ángulo de la estructura pseudo-tetraédrica en estas moléculas.

# GEOMETRIA MOLECULAR.



# GEOMETRIA MOLECULAR.

