

Q U Í M I C A

O R G Á N I C A I

Jorge L. Breña Oré
Enrique F. Neira Montoya



UNI

Editorial Universitaria

Escribir este libro no fue un trabajo sencillo, dado que se trata de transmitir conocimiento y para ello es necesario el uso del lenguaje adecuado. La tarea de revisión y corrección de los impresos fue realizado por la profesora Cristina Viza Llenque a quien le reconocemos su valioso aporte.

LOS AUTORES



CONTENIDO

PREFACIO	13
----------	----

1

QUÍMICA ORGÁNICA

1.1. Introducción	15
1.2. Marco conceptual	18
1.3. Propiedades del carbono	22

2

ALCANOS

2.1. Generalidades	33
2.2. Nomenclatura - alcanos	35
2.3. Propiedades físicas	48
2.4. Fuente de alcanos	52
2.5. Estructura y análisis conformacional	57
2.6. Reacciones de los alcanos	72
Química en acción	88
Aprendizaje significativo	89

3

ESTEREOQUÍMICA

3.1. Enantiómeros	103
3.2. Diastereómeros	121
3.3. Análisis estereomérico	122
3.4. Estereoisomería en cicloalcanos	126
3.5. Estereoquímica dinámica	131
Ejercicio	147
Solución	148
Aprendizaje significativo	149
Química en acción	149

4

HALOGENUROS DE ALQUILO

4.1. Estructura	161
4.2. Nomenclatura	163
4.3. Propiedades físicas de los halogenuros de alquilo	166
4.4. Preparación de halogenuros de alquilo	169
4.5. Reacciones de los halogenuros de alquilo	173
Aprendizaje significativo	222
Química en acción	222
Química ambiental	224
Química tecnológica	232

5	ALQUENOS	241
	<hr/>	
	5.1. Estructura	242
	5.2. Nomenclatura de los alquenos	246
	5.3. Propiedades físicas de los alquenos	248
	5.4. Preparación de alquenos	249
	5.5. Reacciones químicas de los alquenos	252
	5.6. Análisis de alquenos	287
	Aprendizaje significativo	290
	Aprendizaje basado en problemas-ABP	293
	Anteproyecto de reactivación de la industria química	293
	Elaboración del informe	296

6	DIENOS Y POLIENOS	
	<hr/>	
	6.1. Dienos	303
	6.2. Estabilidad de los dienos	304
	6.3. Reacciones de dienos conjugados	310
	6.4. Polienos conjugados	322
	Aprendizaje significativo	330

7	ALQUINOS	
	7.1. Estructura y nomenclatura	333
	7.2. Propiedades físicas	336
	7.3. Estabilidad del acetileno	337
	7.4. Preparación de alquinos	337
	7.5. Propiedades de los alquinos	342
	Aprendizaje significativo	354
	La industria química	355

8	ALCOHOLES	
	8.1. Estructura	363
	8.2. Nomenclatura de los alcoholes	365
	8.3. Propiedades físicas	369
	8.4. Preparación de alcoholes	372
	8.5. Propiedades químicas	383
	8.6. Estructura y propiedades	402
	8.7. Nomenclatura de los éteres	405
	8.8. Síntesis de éteres	406
	8.9. Reacciones de los éteres	408
	8.10. Reacciones de los epóxidos	410
	Aprendizaje significativo	412

9

RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR RMN

9.1. Importancia y campo de aplicación	419
9.2. Fundamentos físicos de la espectroscopia RMN	421
9.3. El espectrómetro RMN	425
9.4. Disolventes deuterados para el RMN	426
9.5. La señal RMN	427

10

ESPECTROMETRÍA DE MASA

10.1. Generalidades y campos de aplicación	447
10.2. Espectrómetro de masas y fundamento	450
10.3. El espectro de masas	452
Aprendizaje significativo	473
Glosario	474
Bibliografía	480
Referencias del internet	481



Me es grato presentar a la comunidad académica de la Universidad Nacional de Ingeniería y el país en general esta colección de libros de texto, publicada en el marco del Programa Editorial Eduardo de Habich, emprendido por nuestra Editorial Universitaria – EDUNI.

La Universidad convocó un concurso que fue realizado internamente en cada Facultad para seleccionar los libros que componen esta colección. De esta manera, estamos premiando el esfuerzo perseverante de nuestros docentes que perfeccionan una y otra vez sus métodos pedagógicos en la experiencia del dictado cotidiano de clases.

Es propósito de este Rectorado continuar alentando la producción bibliográfica de nuestros docentes y egresados que, a no dudarlo, cubre una necesidad académica y profesional.

MAG. ING. AURELIO PADILLA RÍOS
Rector UNI



Prefacio

Muchos autores de textos de química orgánica reconocen que este curso es una materia difícil de aprender; pero también, quizás sea difícil de enseñar, por la cantidad de conocimiento que implica. Ya estamos sobre los 10 millones de compuestos orgánicos y aprender las propiedades y estructura de tal número de compuestos, amerita tal “calificativo”. Este curso no pretende llegar a esos niveles; trata de presentar los fundamentos sobre los cuales se enmarca esta materia y, por ello, es necesario buscar la manera de hacer más fácil la comprensión de la química orgánica.

En los años que estamos dictando este curso en la Universidad Nacional de Ingeniería nos han permitido conocer la problemática de su aprendizaje, no porque los textos empleados no estén al alcance de su comprensión, sino porque el rol de los estudiantes, a veces es pasivo. Muchos de ellos no están comprometidos con su proyecto de formación profesional y en ese contexto no se sigue las recomendaciones, como la lectura previa del tema antes de asistir a las clases, asistencia a las mismas y tomar notas (no solo copiar todo lo escrito en la pizarra), resolver ejercicios, asistir a las tutorías, resignificar lo aprendido a través de mapas mentales, conceptuales, heurísticas de la V de Gowing, diagramas de flujo, etc.

Este libro fue preparado tomando como base las notas de las clases del curso, y fue enriquecido con lecturas de aplicación, temas acerca de ingeniería y actualidad tecnológica que tienen relación con los temas tratados. La experiencia en investigación

nos permite dar una explicación a los fenómenos; pero, sobre todo, los estudiantes pueden percibir estar más cerca del profesor al tener impreso el temario del curso.

El aporte en el presente trabajo no está en los conocimientos de la química orgánica, crédito que debemos reconocer para los libros textos como Química Orgánica de Morrison y Boyd, Primo Yúfera y Wade L. G., sin quitar mérito a otros textos de consulta que siempre fueron tomados en cuenta para su elaboración. Su mérito radica en hacer el aprendizaje significativo más centrado en el estudiante, con la elaboración de redes semánticas que ayudan a la cognición de los conceptos adquiridos.

Finalmente, hay que reconocer que esta “escuela” en la enseñanza de la química orgánica, viene desarrollándose desde nuestros maestros, a quienes tenemos que reconocer, como: Baldomero Malpica, Lucio Ramos, Luis Valles, Marcel Navarro y Juan Quispe.

Capítulo 1

QUÍMICA ORGÁNICA

Friederich Wöhler¹ (Eschersheim, actual Alemania, 1800 -Gotinga, id., 1882), químico alemán. Discípulo de J. Berzelius, enseñó desde 1836 en la Universidad de Gotinga. Su nombre está unido sobre todo a la síntesis de la urea (1828), que tuvo gran repercusión en el desarrollo de la química en el siglo XIX, al echar por tierra la teoría que defendía que los compuestos orgánicos no pueden ser preparados mediante procesos de síntesis. Conjuntamente con Liebig, llevó a cabo investigaciones sobre el ácido úrico y sus derivados. Obtuvo además por primera vez aluminio puro por la acción del potasio sobre el cloruro de dicho metal (1827), aisló el berilio y el itrio, y efectuó importantes descubrimientos sobre el silicio y el boro, de los cuales preparó la forma cristalina. Obtuvo acetileno por la reacción del agua con el carburo de calcio (1862), y con sus trabajos sobre el cianato de plata, contribuyó al descubrimiento de la isomería.



1.1. INTRODUCCIÓN

En el currículo de formación académica de químicos e ingenieros químicos, un curso de química orgánica tiene su lugar como un curso de formación básica, el cual tiene objetivos específicos: conocimiento de la terminología, pues como en cualquier materia, cada término tiene un significado conceptual y describe un fenómeno en particular. Como curso de formación básica, no presenta tecnología, ya que su fin es que el estudiante esté preparado para la lectura y comprensión de literatura especializada. Adicionalmente, desarrolla las propiedades de la materia clasificadas como funciones químicas, describiendo propiedades físicas y químicas, tratando previamente la estructura molecular (la cual es determinante en las propiedades de la materia). Por ejemplo, los

materiales gutapercha y caucho, ambos están formados en base a uniones de moléculas de isopreno, pero tienen propiedades físicas distintas; el caucho es elastómero y la gutapercha no; esta diferencia se debe a la estructura molecular. Las propiedades químicas también pueden ser descritas desde la estructura molecular; así, por ejemplo, el fenol y el ciclohexanol, que contienen el grupo hidroxilo como grupo funcional, presentan un comportamiento diferenciado, ya que el ciclohexanol produce una reacción de eliminación con ácido sulfúrico, mientras que el fenol produce una reacción de sulfonación con este reactivo.

Las propiedades químicas (reacciones) adquieren un poco más de interés en el curso debido a los diversos factores que permiten el desarrollo de ellas como el pH, temperatura, presión, polaridad de solvente, radiación electromagnética, estado de agregación, etc. Incluso factores como la gravedad y el ultrasonido pueden tener efecto en una reacción, la cual puede llegar a ser tan compleja que dos reactantes como, por ejemplo, etanol con ácido sulfúrico en condiciones distintas tienen reacciones distintas: a temperatura elevada (180°C), da como producto etileno, y a menor temperatura, éter etílico. Dentro de las reacciones, es importante conocer los cambios energéticos (termodinámica), el mecanismo de reacción y la cinética, pues, esto nos permite justificar la formación de más de un producto, entre ellos, alguno mayoritario.

La síntesis orgánica también es un objetivo que tiende a describir las rutas sintéticas de moléculas desde alguna fuente. Las síntesis se hacen, como principio, desde materiales abundantes baratos hacia materiales menos accesibles con mejores propiedades y de mayor valor económico. Se puede decir, entonces, que también tienen intenciones económicas aunque no se hace ningún cálculo de costos.

La industria química no sólo implica la síntesis, sino también la separación de componentes químicos o su formulación. Por ejemplo, la destilación de petróleo y la extracción de la cafeína del café son procesos de separación. Las separaciones pueden tener un carácter físico-químico si sólo se aplican propiedades físico-químicas, o un carácter químico si es necesario aplicar reacciones. En cuanto a la formulación, se puede citar como ejemplo una pintura que simplemente es la mezcla de varios componentes como una resina, pigmento y agentes dispersantes, estabilizantes, etc. La calidad de la pintura dependerá de la formulación que consiga las mejores propiedades.

Adicionalmente, es necesario hacer caracterizaciones de los productos orgánicos (sea que se obtengan por síntesis, separación o formulación), por propiedades químicas o físicas. Entre las primeras, se debe saber aplicar las reacciones para identificar (análisis cualitativo) y en algunos casos, cuantificar

un material químico (análisis cuantitativo). Dentro de las aplicaciones físicas, son de interés las técnicas espectroscópicas; sin embargo, en el presente curso, sólo se incide en los fundamentos de la espectroscopia y su aplicación para identificar estructuras moleculares; la cuantificación, es tema de otro curso.

Finalmente, considerando los problemas de contaminación e impacto ambiental, la química orgánica juega un rol importante, pues genera productos, desechos sólidos, efluentes y emisiones gaseosas muy contaminantes, relacionados, por ejemplo, con la reducción de la capa de ozono, efecto invernadero, smog fotoquímico, lluvia ácida, armas químicas, etc., y es obligación de los químicos orgánicos ejercer su profesión con responsabilidad social o, por lo menos, dar a conocer a su comunidad los riesgos y cuidados que se deben tener en la manipulación, procesamiento e impactos que se ocasionen si no se gestionan adecuadamente los mismos.

1.2. MARCO CONCEPTUAL

La química orgánica, al ser la química de los compuestos del carbono, se concentra en compuestos covalentes, razón por la cual, el estudiante debe manejar con buen criterio, los términos relacionados con el tema. Además, debe conocer los principios energéticos asociados a las reacciones químicas, la termodinámica (termoquímica) y la cinética química. La Figura 1.1 muestra un mapa conceptual de lo que el alumno debe conocer para iniciar el curso.

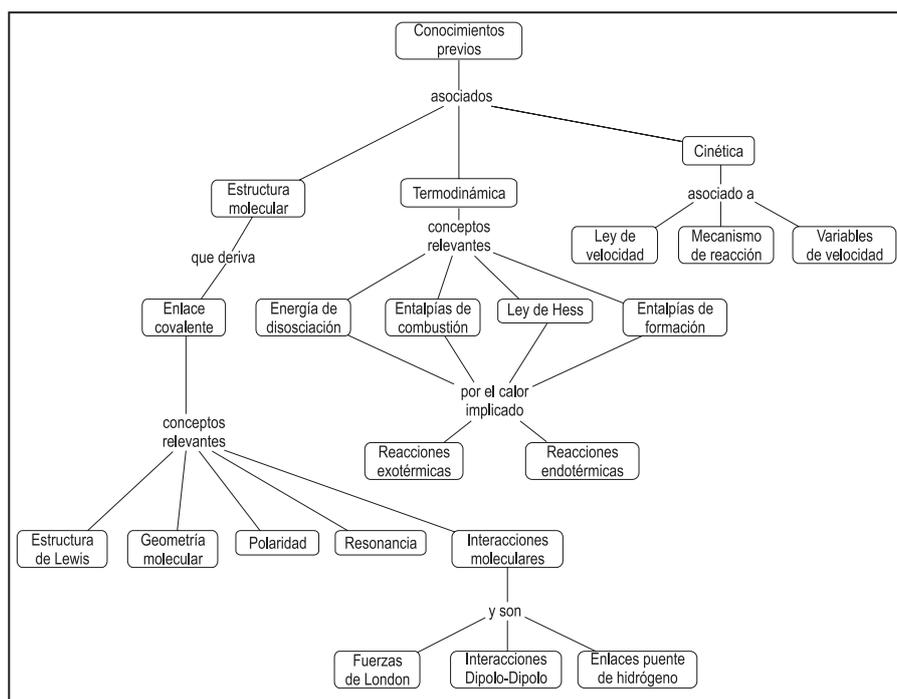


Figura 1.1. Mapa conceptual de los conceptos que el estudiante debe manejar antes de iniciar el curso de química orgánica.

Respecto al tema de **enlace covalente**, el estudiante debe ser capaz de construir un mapa cognoscitivo sobre el tema, mapa que debería ser equivalente en gran medida al mapa conceptual propuesto en la Figura 1.2, donde se muestra un panorama general del mismo.

El mapa cognoscitivo es un esquema representativo de una imagen o representación mental de cómo el sujeto ha asimilado los conceptos de una determinada unidad semántica. Es de carácter singular, individual y evidentemente, subjetivo, mientras que el mapa conceptual es de carácter social y responde a la lógica de las disciplinas científicas; por lo tanto, es más reproducible y responde a la unidad semántica en estudio.

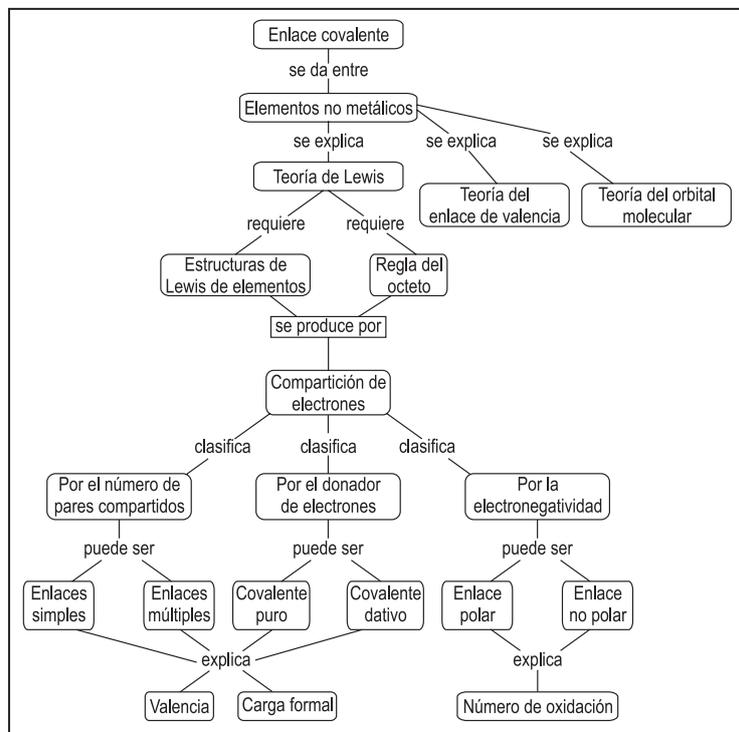


Figura 1.2. Mapa conceptual con los conceptos previos que el alumno debe manejar sobre el enlace covalente.

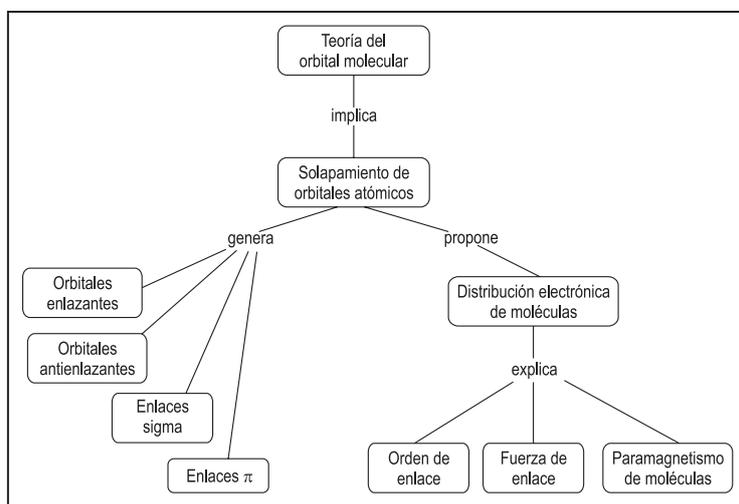


Figura 1.3. Mapa conceptual de los conceptos previos que el alumno debe manejar sobre la teoría del orbital molecular.

EJERCICIO

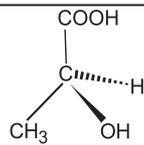
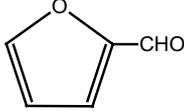
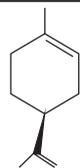
Representar mapas cognoscitivos sobre los siguientes contenidos asimilados en los cursos de química general y físico-química:

- Interacciones moleculares
- Cinética química
- Termoquímica

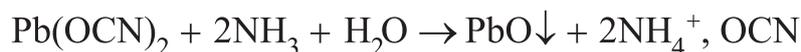
La **química orgánica** es la ciencia que estudia las estructuras, reacciones químicas y síntesis de los compuestos orgánicos. Su campo de trabajo es vastísimo, resulta fundamental para la comprensión de la vida y sus procesos, así como de los materiales indispensables para el bienestar del hombre, tales como: la gasolina, fibras sintéticas, plásticos, resinas, fármacos, etc.

A inicios del siglo XIX, en 1807, Jöns Jacob Berzelius, quien se había formado en medicina, asignó el nombre “química orgánica” al estudio de los compuestos procedentes de fuentes naturales de seres vivos. Berzelius, como la mayoría de los científicos de su tiempo, avaló la teoría del vitalismo. Esta teoría sostenía que los seres vivos estaban dotados de una fuerza vital inspirada divinamente, razón por la cual, se creía que jamás podrían ser sintetizados.

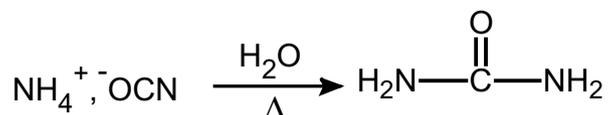
Cuadro 1.1. Compuestos orgánicos y sus fuentes naturales.

Fuente natural	Compuesto orgánico
Fermentación de la uva	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$
Fermentación del suero de leche	
Madera	
Grasa animal	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{16}\text{COONa}$
Cáscara de naranja	

Uno de los primeros experimentos que condujeron al abandono de la teoría vitalista lo efectuó Friedrich Whöler. Él se hallaba estudiando las sales de ácido cianico, HOCN, y en 1828 informó de sus intentos de obtención de cianato de amonio, NH_4^+OCN . Whöler esperaba que tenga lugar la siguiente reacción:



Whöler hizo reaccionar el cianato de plomo (II) con amoníaco acuoso, filtró el PbO obtenido y evaporó el agua por ebullición, con el fin de aislar el producto restante. De este modo, obtuvo un sólido cristalino blanco que no presentaba las propiedades esperadas para el cianato de amonio. Whöler demostró que el producto que había aislado era urea, la cual sólo se había obtenido anteriormente a partir de la orina de los seres humanos. Lo que ocurrió es que en el proceso de calentamiento, el cianato de amonio se había convertido en urea:



Este experimento es reconocido ahora como un hito científico y la primera etapa hacia la extinción de la filosofía del vitalismo.

Cuadro 1.2. Comparación genérica entre los compuestos orgánicos e inorgánicos a masa molar comparable y considerando la mayoría de compuestos de cada tipo.

Orgánicos	Inorgánicos
• La mayoría son covalentes.	• La mayoría tiene carácter iónico acentuado.
• Sus puntos de fusión y ebullición son bajos.	• Sus puntos de fusión y ebullición son elevados.
• Son insolubles en el agua y solubles en solventes orgánicos: gasolina, éter, CCl_4 , benceno, acetona.	• Son solubles en agua e insolubles en solventes orgánicos.
• Son volátiles, inflamables y combustibles.	• No son volátiles, inflamables ni combustibles.
• ~ 90% de los compuestos químicos son orgánicos.	• 10 % de los compuestos químicos son inorgánicos.
• Sus soluciones no son electrolíticas.	• Sus soluciones son electrolíticas.
• Se descomponen a temperaturas moderadas: < 400 °C.	• Se descomponen a temperaturas elevadas: > 1000 °C.

1.3. PROPIEDADES DEL CARBONO

1.3.1. Alotropía

Hasta hace poco, se creía que solamente existían dos formas alotrópicas: grafito y diamante; ambas sólidos con redes covalentes.

En el diamante, cada átomo de carbono, con hibridación sp^3 , está enlazado tetraédricamente a otros cuatro átomos de carbono; al estar todos los enlaces saturados, resulta ser un pésimo conductor del calor y la electricidad. Para moverse en un plano de átomos en el cristal del diamante en relación con otro, se requiere romper muchos enlaces fuertes C-C, lo que explica que el diamante sea uno de los minerales de mayor dureza.

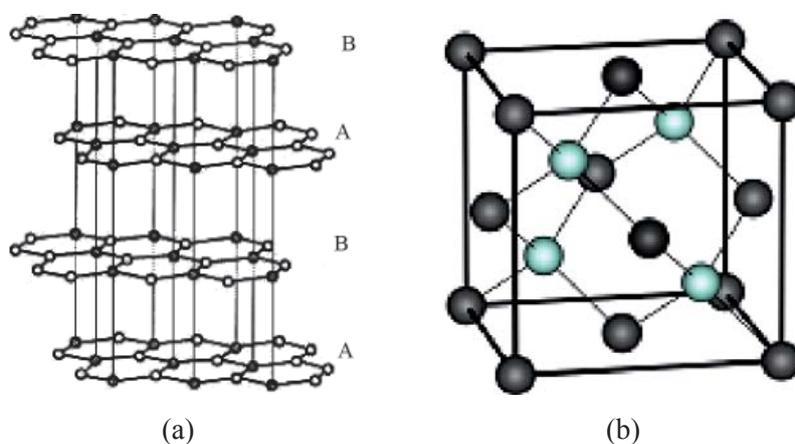


Figura 1.4. Estructuras Cristalina del (a) Grafito² y (b) Diamante.

El grafito es una sustancia negra que tiene una estructura de capas. Cada capa consiste en átomos de carbono enlazados a otros tres átomos de carbono para dar un patrón hexagonal de átomos acomodados en un plano. Los átomos comprenden una hibridación sp^2 con un sistema de electrones π deslocalizados, responsables de la conductividad eléctrica. Las capas de grafito están unidas por fuerzas de Van der Waals, lo que explica que las capas se deslicen unas sobre otras y den como resultado una sustancia de baja dureza.

Los fullerenos, la tercera forma alotrópica del carbono, fueron descubiertos en 1985 por el británico Harold Kroto y los americanos Robert Curl y Richard Smalley. Por este descubrimiento, les otorgaron el Premio Nobel de Química en 1996. Los fullerenos están formados por átomos de carbono que presentan una hibridación intermedia entre la sp^2 y la sp^3 . Este tipo de hibridación hace

posible que los átomos de carbono puedan combinarse formando hexágonos y pentágonos en estructuras tridimensionales cerradas. El fullereno más común es el C_{60} (de 60 átomos de carbono) y es similar a un balón de fútbol, aunque también se ha reportado otros fullerenos: C_{76} , C_{100} , etc.

APLICACIONES POTENCIALES DE LOS FULLERENOS

- *Polímeros electroactivos (dando reacciones de transferencia electrónica).*
- *Polímeros con propiedades de limitadores ópticos (láseres).*
- *Dispositivos fotoconductores y creación de nuevas redes moleculares.*
- *Superconductores, catalizadores*
- *Biomedicina: destaca sin duda el estudio de las propiedades de ciertos derivados organometálicos de los fullerenos solubles en agua, que han mostrado una actividad significativa contra el SIDA, VIH-1 y VIH-2.*

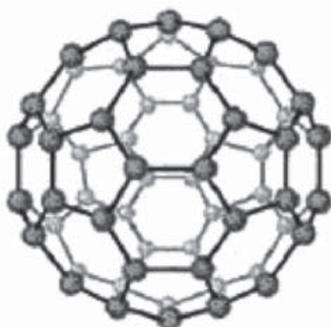


Figura 1.5. Estructura del fullereno C_{60} .³

En 1991, Sumio Iijima descubrió nanotubos de carbón cuando estaba realizando investigaciones con fullerenos. Los nanotubos de carbón son las fibras más fuertes que se conocen. Un solo nanotubo perfecto es de diez a cien veces más fuerte que el acero por unidad de masa y poseen propiedades eléctricas muy interesantes. Los nanotubos de carbón muestran también estas hibridaciones intermedias y pueden considerarse como láminas de grafito enrolladas en

forma de tubos. Los nanotubos pueden ser abiertos o cerrados, en cuyo caso, la estructura que cierra el nanotubo es similar a la mitad de un fullereno. La nanoespuma de carbón está considerada también como una forma alotrópica del carbono, en la que los átomos de carbono presentan este tipo de hibridación intermedia. En esta forma alotrópica, los átomos de carbono se combinan en hexágonos y heptágonos, dando lugar, al contrario de los fullerenos, a una curvatura inversa. Estas estructuras presentan un electrón desapareado.

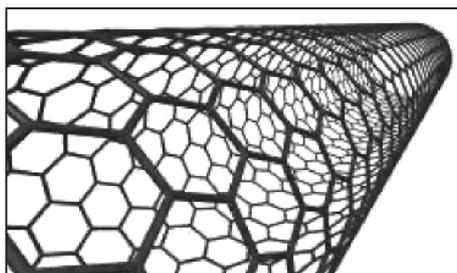


Figura 1.6. Estructura de una Nanotubo⁴.

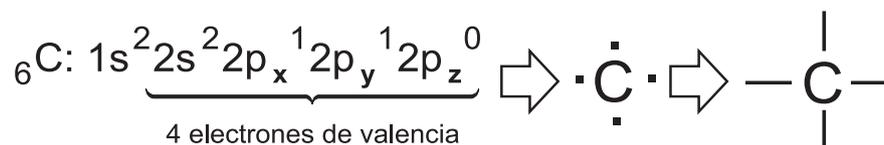
La investigación sobre nanotubos de carbono es tan apasionante (por sus múltiples aplicaciones y posibilidades) como compleja (por la variedad de sus propiedades electrónicas, térmicas y estructurales, que cambian según el diámetro, la longitud, la forma de enrollar).

APLICACIONES POTENCIALES DE LOS NANOTUBOS

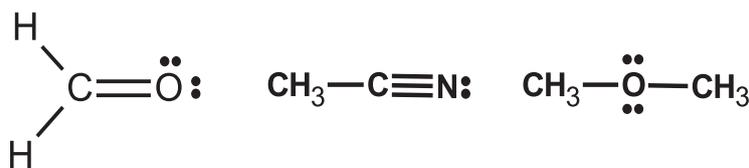
- *Electrónicamente, pueden comportarse como metálicos, semimetálicos o aislantes dependiendo de su diámetro.*
- *Elevada resistencia mecánica.*
- *Sus propiedades pueden modificarse encapsulando metales o gases en su interior, obteniéndose nanocables eléctricos o magnéticos.*
- *Almacenamiento de hidrógeno gaseoso.*
- *Diseño de pantallas planas por su buena capacidad como emisores de electrones.*
- *Combinados con la biotecnología, son importantes en especial para la genómica y la proteómica.*

1.3.2. Tetravalencia

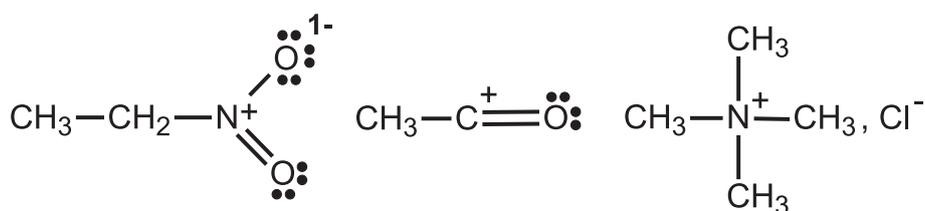
El átomo de carbono, en gran parte la generalidad de sus compuestos orgánicos neutros es tetravalente; es decir, forma cuatro enlaces covalentes.



Por analogía, se puede inferir que el átomo de hidrógeno y los halógenos son monovalentes, el átomo de oxígeno es divalente y el átomo de nitrógeno es trivalente. Esta regla empírica no significa que el átomo de oxígeno no pueda formar un solo enlace o tres enlaces; lo mismo ocurre con el nitrógeno, que algunas veces puede tener dos o cuatro enlaces, pero en estos casos, los átomos tienen carga formal y representan estructuras menos estables que cuando los átomos **no** presentan carga formal.



Moléculas cuyos átomos no presentan cargas formales.



Moléculas cuyos átomos presentan cargas formales.

1.3.3. Naturaleza única del carbono

Una razón de la naturaleza única del carbono es la autosaturación, que es la elevada energía de disociación del enlace C-C, comparado con los otros elementos.

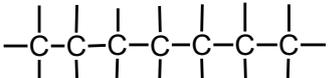
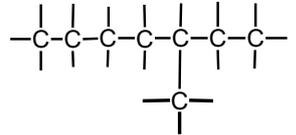
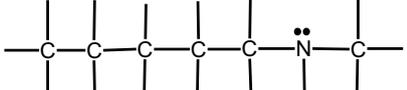
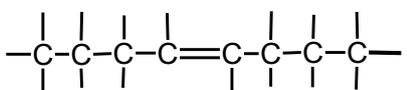
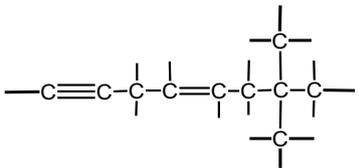
Cuadro 1.3. Energía de Disociación de los Enlaces X - X.

Enlace implicado	D (kcal / mol)
C - C	~ 85 - 88
Si - Si	~ 53
N - N	~ 50
O - O	~ 34

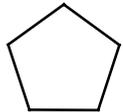
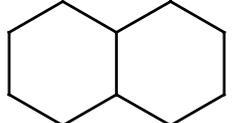
Es decir, la formación del enlace C - C libera más energía, y por tanto, se estabiliza mejor con relación a la formación de los otros tipos de enlaces.

La propiedad de la autosaturación atribuida al carbono determina que forme cadenas carbonadas mediante enlaces simples, dobles y/o triples, abiertas, cerradas, con o sin ramificación, generando con pocos elementos una infinidad de compuestos, siendo responsable de que más del 90% de los compuestos químicos sean orgánicos.

Cuadro 1.4. Tipos de cadenas carbonadas abiertas.

Cadenas carbonadas	Tipos de cadenas carbonadas
	Cadena acíclica no ramificada (saturada)
	Cadena acíclica ramificada (saturada)
	Cadena acíclica no ramificada (saturada)
	Cadena acíclica no ramificada (no saturada)
	Cadena acíclica ramificada (no saturada)

Cuadro 1.5. Tipos de cadenas carbonadas cerradas.

Cadenas carbonadas	Tipos de cadenas carbonadas
	Cadena alicíclica (homocíclico)
	Cadena policíclica (espirano)
	Cadena policíclica (bicyclo)
 	Cadena aromática

1.3.4. Hibridación

El compuesto orgánico más simple es el metano, CH_4 . Los químicos explican la geometría tetraédrica utilizando el concepto de hibridación de orbitales. De acuerdo con esta idea, los orbitales moleculares se originan por solapamiento de orbitales atómicos híbridos de un átomo en lugar de orbitales atómicos puros. Los orbitales híbridos son combinaciones matemáticas de las funciones de onda de los orbitales atómicos que explican la formación de nuevas funciones de onda para los orbitales híbridos formados y que nos permiten explicar ángulos de enlace, longitudes de enlace, energías de disociación, pequeñas diferencias de electronegatividad, etc.; aclarando que estos orbitales híbridos no tienen significado físico, pero sí se representan físicamente.

Las consideraciones tomadas en cuenta para describir los procesos de hibridación son:

- En el proceso de hibridación, se produce la combinación lineal de funciones de onda de orbitales atómicos del mismo nivel.
- El número de orbitales híbridos que resulta del proceso de hibridación es igual al número de orbitales atómicos que se combinan.

- Los orbitales híbridos “s” confieren “abultamiento” al orbital híbrido, mientras que los orbitales “p” confieren direccionalidad.
- A mayor carácter “s” del orbital híbrido, el núcleo del átomo retiene más densidad electrónica en sus alrededores formando así enlaces más fuertes, más cortos y de mayor ángulo de enlace.

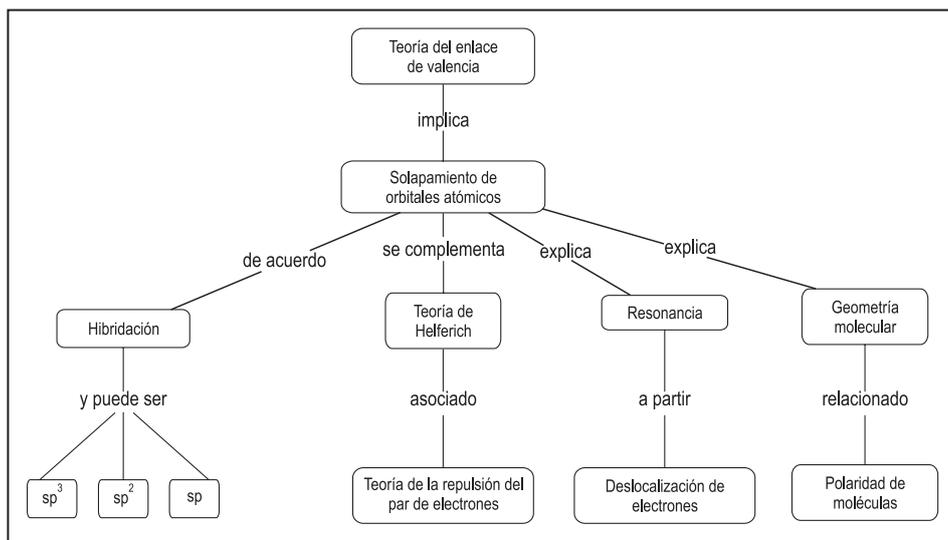
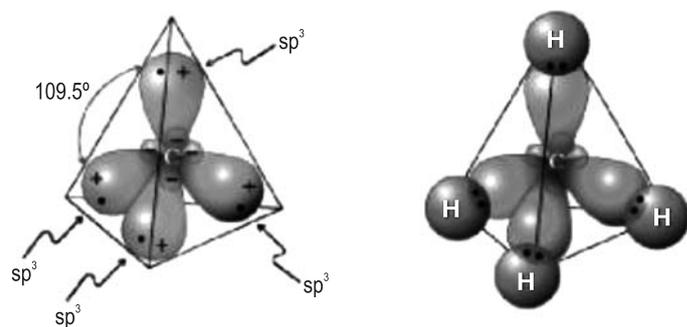
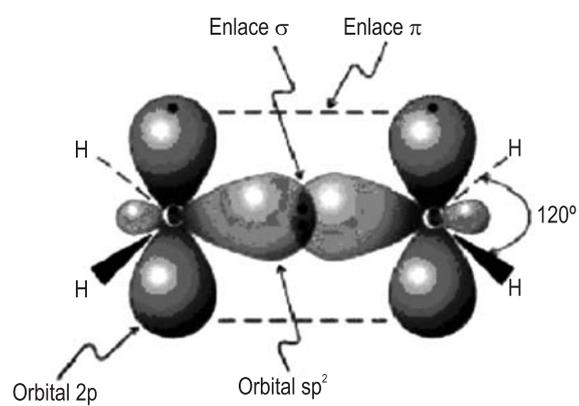


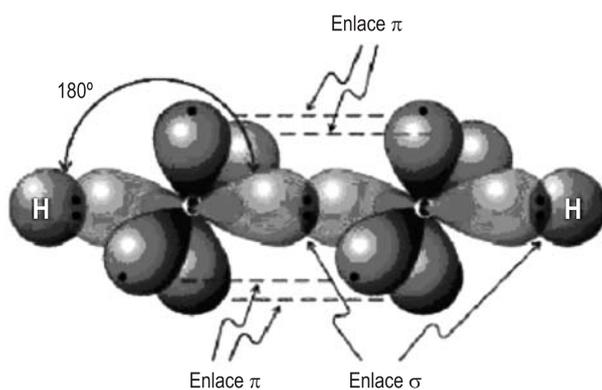
Figura 1.7. Mapa conceptual sobre la teoría del enlace de valencia.



(a) Orbitales híbridos sp^3 . **METANO**



(b) Orbitales híbridos sp^2 . **ETENO**



(c) Orbitales híbridos sp . **ETINO**

Figura 1.8. Orbitales híbridos en moléculas simples⁵.

Considerando una aproximación a moléculas simples, la hibridación de los átomos centrales está determinada por la suma de los enlaces sigma más los pares libres que rodean el átomo central.

Geometría molecular

Sea la molécula AX_n donde "A" es el átomo central

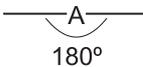
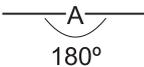
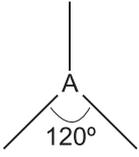
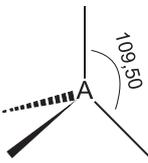
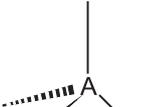
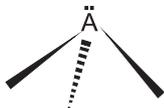
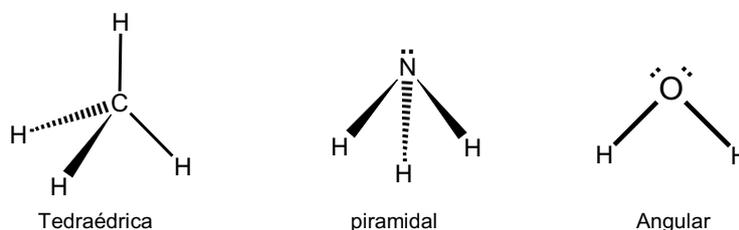
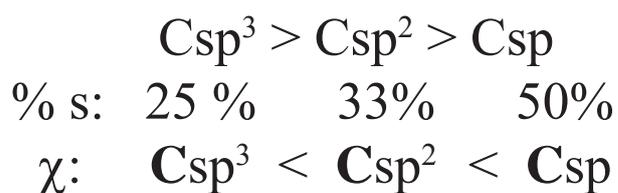
Enlaces σ más pares libres de A	Hibridación	Estructura	Pares libres de A	Geometría molecular
2	sp		0	 Lineal
3	sp^2		1 0	 Angular  Triangular
4	sp^3		0 1 2	 Tetraédrica  Piramidal  Angular

Figura 1.9. Hibridación *versus* geometría molecular.

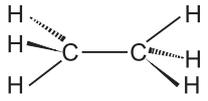
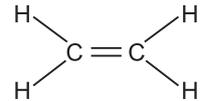
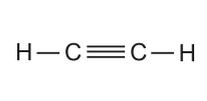
Veamos algunos ejemplos:



A mayor carácter “s” de los orbitales híbridos, mayor es el grado de solapamiento en la formación de los orbitales moleculares, generando: mayor electronegatividad (χ) de los átomos implicados, enlaces más estables, más fuertes (mayor energía de disociación), de menor longitud de enlace y mayor ángulo de enlace.



Cuadro 1.6. Propiedades⁶ versus Hibridación.

Propiedad		Hidrocarburo		
				
Longitud de enlace	C-C	153 pm	134 pm	121 pm
	C-H	110 pm	108 pm	106 pm
Energía de disociación	C-C	88 kcal/mol	145 kcal/mol	190 kcal/mol
	C-H	104 kcal/mol	108 kcal/mol	125 kcal/mol
Ángulo de enlace		109,5°	120°	180°
Hibridación del C		sp ³	sp ²	sp
%S		25%	33%	50%
pKa		50	45	26