

COMPUESTOS DE CARBONO.

EL ÁTOMO DE CARBONO 1ª parte.

http://www.natureduca.com/quim_compucar_atomo01.php

Natureduca. Portal educativo de ciencias naturales y aplicadas, tecnología e internet. El ciclo de Nitrógeno. Asociación española para la cultura, el Arte y la Educación.

www.asocae.org -

Configuración electrónica



El átomo de carbono constituye el elemento esencial de toda la química orgánica, y dado que las propiedades químicas de elementos y compuestos son consecuencia de las características electrónicas de sus átomos y de sus moléculas, es necesario considerar la configuración electrónica del átomo de carbono para poder comprender su singular comportamiento químico.

Se trata del elemento de número atómico $Z = 6$. Por tal motivo su configuración electrónica en el estado fundamental o no excitado es $1s^2 2s^2 2p^2$. La existencia de cuatro electrones en la última capa sugiere la posibilidad bien de ganar otros cuatro convirtiéndose en el ion C^{4-} cuya configuración electrónica coincide con la del gas noble Ne, bien de perderlos pasando a ion C^{4+} de configuración electrónica idéntica a la del He. En realidad una pérdida o ganancia de un número tan elevado de electrones indica una dosis de energía elevada, y el átomo de carbono opta por compartir sus cuatro electrones externos con otros átomos mediante enlaces covalentes. Esa cuádruple posibilidad de enlace que presenta el átomo de carbono se denomina tetravalencia.

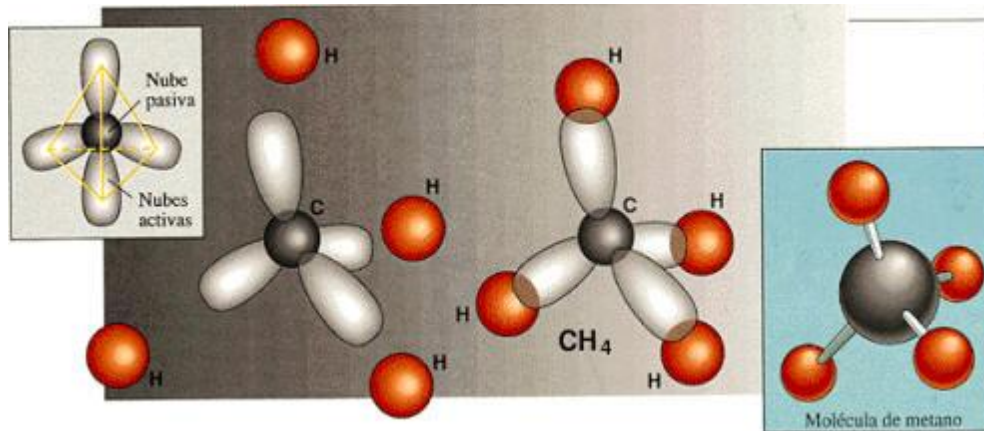
Enlaces

Los cuatro enlaces del carbono se orientan simétricamente en el espacio de modo que considerando su núcleo situado en el centro de un tetraedro, los enlaces están dirigidos a lo largo de las líneas que unen dicho punto con cada uno de sus vértices. La formación de enlaces covalentes puede explicarse, recurriendo al modelo atómico de la mecánica cuántica, como debida a la superposición de orbitales o nubes electrónicas correspondientes a dos átomos iguales o diferentes.

Así, en la molécula de metano CH_4 (combustible gaseoso que constituye el principal componente del gas natural), los dos electrones internos del átomo de C , en su movimiento en torno al núcleo, dan lugar a una nube esférica que no participa en los fenómenos de enlace; es una *nube pasiva*.

Sin embargo, los cuatro electrones externos de dicho átomo se mueven en el espacio formando una *nube activa* de cuatro lóbulos principales dirigidos hacia los vértices de un tetraedro y que pueden participar en la formación del enlace químico.

Cuando las nubes electrónicas de los cuatro átomos de hidrógeno se acercan suficientemente al átomo de carbono, se superponen o solapan con los lóbulos componentes de su nube activa, dando lugar a esa situación favorable energéticamente que denominamos enlace.



Los cuatro enlaces del carbono están orientados en el espacio a lo largo de las líneas que unen el centro geométrico de un tetraedro regular con sus cuatro vértices.

Todos los enlaces $\text{C} \text{---} \text{H}$ en el metano tienen la misma longitud $1,06 \text{ \AA}$ ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$) y forman entre, sí ángulos iguales de 109

Tal situación define la geometría tetraédrica característica de los enlaces del carbono. La propiedad que presentan los átomos de carbono de unirse de forma muy estable no sólo con otros átomos, sino también entre sí a través de enlaces $\text{C} \text{---} \text{C}$, abre una enorme cantidad de posibilidades en la formación de moléculas de las más diversas geometrías, en forma de cadenas lineales, cadenas cíclicas o incluso redes cúbicas. Éste es el secreto tanto de la diversidad de compuestos orgánicos como de su elevado número.

El carbono frente al silicio



Debe preguntarse si la situación del carbono es singular o si por el contrario algún otro elemento participa de sus mismas propiedades. Observando el sistema periódico se advierte que el silicio está situado en el mismo grupo justo debajo del carbono y con idéntica configuración electrónica externa.

¿Por qué razón la vida se ha desarrollado sobre los compuestos del carbono y no sobre los del silicio?

¿Por qué los derivados del silicio son tan poco numerosos frente a los del carbono?

La existencia en el silicio de ocho electrones internos adicionales respecto del carbono hace que los electrones externos o de valencia responsables del enlace químico estén más alejados del núcleo y, por tanto, atraídos por él más débilmente. Ello se traduce en que la fuerza de los enlaces del silicio es comparativamente menor; particularmente lo es el enlace Si-Si (cuya energía de enlace es aproximadamente la mitad de la del enlace C --- C), lo que le convierte en más reactivo, es decir, menos estable químicamente.

No obstante, el silicio cristaliza formando una red tridimensional semejante a la del diamante, y sus derivados constituyen el 87 % de la composición de la corteza terrestre. Su combinación con el oxígeno origina la sílice o cuarzo (SiO₂). El carácter francamente polar de esta unión da lugar a estructuras reticulares o redes cristalinas que por sus propiedades se parecen enormemente a las de los sólidos iónicos.

Hibridación de orbitales

La geometría de las moléculas en general y la de los compuestos del carbono en particular, puede explicarse recurriendo a la idea de hibridación de orbitales. El análisis de tres átomos típicos, el berilio (Be), el boro (B) y el carbono (C) permite ilustrar este fenómeno mecanocuántico. El berilio tiene como configuración electrónica $1s^2 2s^2$; a pesar de que todos sus orbitales están completos se combina dando lugar a moléculas lineales con dos enlaces.

La explicación de este hecho experimental es la siguiente: cuando el átomo de Be se excita, un electrón $2s$ es promovido al orbital $2p_x$ y la configuración electrónica del berilio excitado, Be*, se convierte en $1s^2 2s^1 2p_x^1$. Los dos electrones desapareados $2s$ y $2p_x$ pueden dar lugar a sendos enlaces, que por sus características deberían ser de diferente intensidad. La observación experimental demuestra, sin embargo, que ambos enlaces son equivalentes y la teoría cuántica del enlace químico explica este hecho recurriendo a la idea de hibridación.

Cuando el berilio se excita, se produce una combinación entre los orbitales $2s$ y $2p_x$ que da lugar a sendos orbitales híbridos sp equivalentes.

En el átomo de boro, de configuración electrónica $1s^2 2s^2 p^1$, sucede algo similar y el boro excitado, B^* , alcanza la configuración $1s^2 2s^1 2p^1_x 2p^1_y$ por la promoción de un electrón $2s$ a un orbital $2p$. Los orbitales correspondientes a los tres electrones desapareados se hibridan dando lugar a tres orbitales equivalentes sp^2 que determinan la geometría trigonal plana de sus enlaces.

El átomo de carbono, con configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p^2$ en el estado fundamental, se convierte, por efecto de la excitación, en $1s^2 2s^1 2p^1_x 2p^1_y 2p^1_z$ con cuatro electrones desapareados, cuyos orbitales respectivos se hibridan para dar lugar a otros tantos orbitales equivalentes sp^3 cuyos lóbulos se orientan tetraédricamente. Los lóbulos principales de los orbitales que resultan de la hibridación se denominan, con frecuencia, nubes activas porque son ellas las que participan en la formación del enlace.

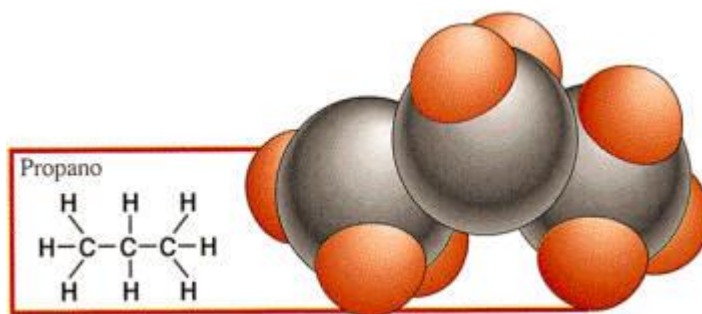
ESTRUCTURA DE HIDROCARBUROS

http://www.natureduca.com/quim_compucar_eshidro01.php

La geometría de sus moléculas



Los hidrocarburos son los derivados del carbono más sencillos. Resultan de la unión únicamente de átomos de carbono con átomos de hidrógeno y de átomos de carbono entre sí formando cadenas que pueden ser abiertas o cerradas y cuyos «eslabones» pueden estar unidos por enlaces simples o por enlaces múltiples. Aquellos hidrocarburos que presentan únicamente enlaces simples reciben el nombre de hidrocarburos saturados (alcanos).



El propano es un hidrocarburo saturado de tres carbonos. Para conseguir una mínima

repulsión entre los pares de electrones de enlace los átomos de hidrógeno de cada grupo eluden posiciones enfrentadas.

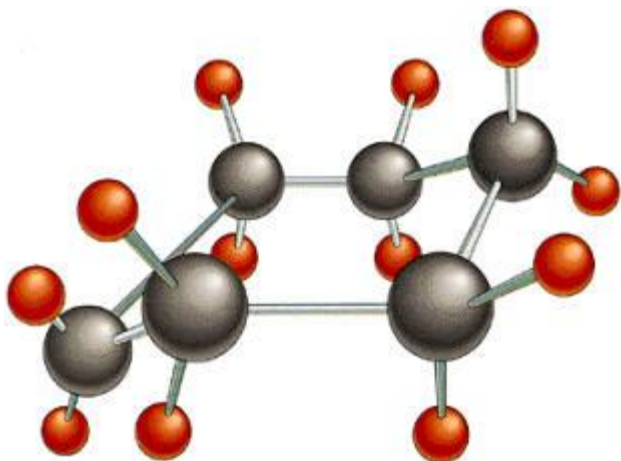
El representante más sencillo de los hidrocarburos saturados es el metano CH_4 ; no obstante, el etano C_2H_6 da una mejor idea de las características de este tipo de hidrocarburos. La molécula de etano está compuesta por dos átomos de carbono y seis átomos de hidrógeno que se unen entre sí mediante enlaces covalentes sencillos.

Desde un punto de vista puramente geométrico se puede representar la molécula de etano mediante dos tetraedros contiguos y opuestos por uno de sus vértices, en donde los dos átomos de carbono ocupan los centros de los respectivos tetraedros, y los de hidrógeno los vértices libres.

Todos los enlaces $\text{C}-\text{H}$ tienen la misma longitud igual a $1,06 \text{ \AA}$, mientras que el enlace $\text{C}-\text{C}$, de características electrónicas diferentes, presenta un valor superior e igual a $1,54 \text{ \AA}$. El resto de los compuestos de esta serie de hidrocarburos de cadena abierta puede obtenerse intercalando en el etano sucesivamente grupos $-\text{CH}_2-$.

Las cadenas de los hidrocarburos saturados pueden también cerrarse formando estructuras cíclicas. El ciclohexano es un ejemplo. Los enlaces $\text{C}-\text{C}$ forman una estructura hexagonal, no plana. Pueden presentarse dos posibles disposiciones geométricas de sus átomos en el espacio respetando la geometría tetraédrica de los enlaces del carbono: una en forma de silla y otra en forma de barco.

En cada uno de los vértices, los enlaces correspondientes se dirigen hacia los vértices de un tetraedro imaginario, es decir, formando ángulos de 109° aproximadamente. Si la estructura molecular fuera plana como en un hexágono, los ángulos CCC serían iguales a 120° , lo que no es compatible con la geometría tetraédrica de los enlaces del carbono en los hidrocarburos saturados. Dicha geometría explica entonces la conformación de la molécula.



La molécula de ciclohexano es un ejemplo de hidrocarburo saturado cíclico o de cadena cerrada. Sus átomos se pueden disponer dando lugar a dos estructuras geométricas diferentes de la misma molécula denominadas conformaciones.

Los hidrocarburos no saturados se caracterizan, desde el punto de vista de su estructura molecular, por la presencia de enlaces dobles (alquenos) o triples (alquinos). La molécula de eteno o etileno está formada por dos átomos de carbono unidos por un enlace doble; mediante sus otros dos enlaces restantes cada átomo de carbono se une a otros tantos átomos de hidrógeno.

La existencia de un doble enlace modifica considerablemente la geometría de la molécula de eteno respecto de la de etano, ahora los ángulos HCH y HCC son iguales a 120° como corresponde a una estructura plana. Además la longitud de enlace C --- C se acorta pasando de los 1,54 Å en el etano a 1,34 Å en el eteno, indicando con ello que la unión es más fuerte. A diferencia de lo que sucede con un enlace sencillo, un enlace múltiple impide la rotación de la molécula en torno a él y le confiere, por tanto, una cierta rigidez.

ESTRUCTURA DE HIDROCARBUROS

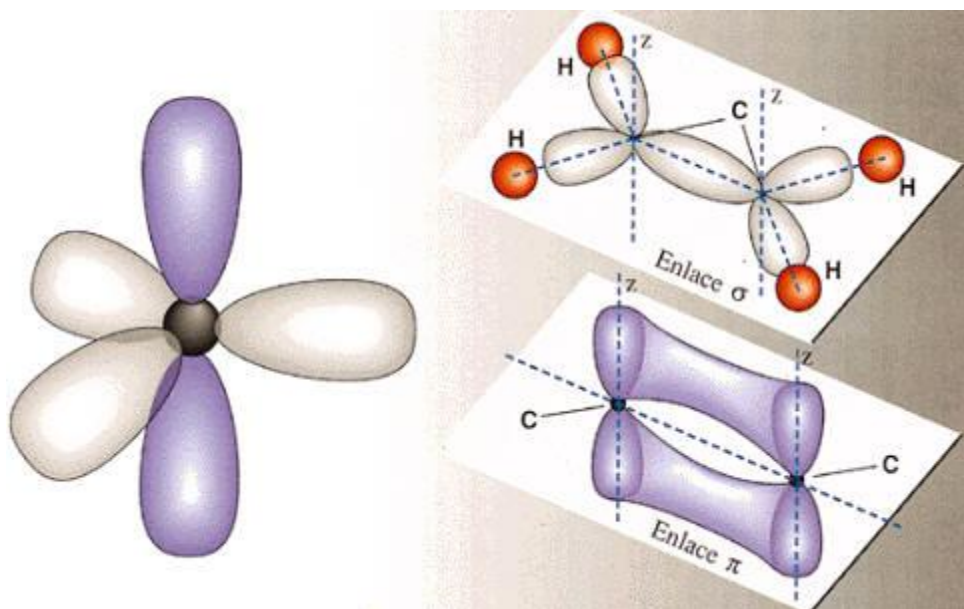
http://www.natureduca.com/quim_compucar_eshidro02.php

Enlaces σ y enlaces π



la vista de la forma en la que los enlaces se representan en las fórmulas químicas puede pensarse que los diferentes enlaces de una unión múltiple entre dos átomos de carbono son equivalentes. Sin embargo, tanto la observación experimental como los resultados de la teoría del enlace químico indican que ello no es así; los dos enlaces de una unión doble no tienen la misma fuerza, uno se asemeja al de la unión simple carbono-carbono y recibe el nombre de *enlace σ* ; el otro es más frágil y se denomina *enlace π* .

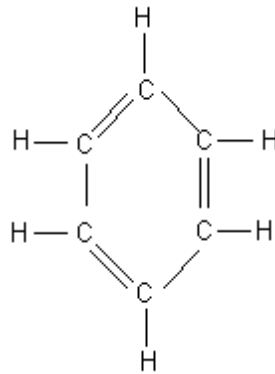
Esta situación puede explicarse de forma cualitativa recurriendo a la imagen de las nubes activas; a diferencia de lo que sucede en el etano, en el eteno pueden distinguirse para cada átomo de carbono dos tipos de nubes activas, una con tres lóbulos principales se encuentra en el plano de la molécula, la otra con dos se halla en un plano perpendicular. El solapamiento frontal de las primeras da lugar a enlaces σ con los átomos de H y entre los átomos de C; el solapamiento lateral de las segundas produce el enlace π más débil.



El solapamiento frontal entre dos lóbulos, uno de cada átomo de carbono del primer grupo, da lugar a un tipo de enlace denominado σ mientras que el solapamiento lateral de las nubes activas del segundo grupo da lugar a un enlace π .

Una situación de enlace peculiar es la que presenta el benceno, un hidrocarburo cíclico y no saturado de singular importancia en la química orgánica. Aunque como el ciclohexano el benceno posee un «esqueleto» de átomos de carbono formado por seis

unidades, presenta una diferencia importante, la presencia de dobles enlaces, tantos como le permite la tetravalencia del carbono. De acuerdo con ella, cualquiera de las siguientes estructuras, por ejemplo, se ajustaría correctamente a su fórmula molecular C_6H_6 :



Empleando un esquema de planos perpendiculares para distinguir entre los enlaces σ y los enlaces π ambas estructuras se podrían representar como en la figura adjunta.

Las nubes electrónicas activas, cuyo solapamiento frontal genera los enlaces σ , están todas en un mismo plano, lo que da lugar a una estructura plana formando un hexágono regular. Las nubes electrónicas cuyo solapamiento lateral produce los enlaces π se encuentran en un plano perpendicular al de la molécula.

Aun cuando las estructuras de partida parecen distinguir entre los enlaces dobles y los sencillos en la molécula de benceno, observaciones experimentales han puesto de manifiesto que la longitud de los diferentes enlaces $C-C$ es idéntica e igual a $1,39 \text{ \AA}$, es decir, intermedia entre la de un enlace sencillo ($1,54 \text{ \AA}$) y uno doble ($1,34 \text{ \AA}$).

Estudios teóricos refuerzan la idea de que en el benceno se produce un solapamiento lateral generalizado de las nubes situadas en planos perpendiculares al de la molécula, lo que se traduce en sendos anillos superior e inferior. Eso significa que los electrones que participan en los enlaces π están deslocalizados, es decir, no pueden ser asignados a ningún par de átomos en concreto. Esta deslocalización da lugar a una importante disminución en la energía potencial de la molécula, lo que explica la considerable estabilidad química de este compuesto orgánico y de sus análogos.