

REACTIVIDAD. CONCEPTOS BÁSICOS**Objetivos**

Conocer los diferentes tipos de reacción según los criterios que se utilicen, poniendo énfasis en la variación del esqueleto carbonado y el modo de formación y ruptura de enlaces. Conocer el concepto de intermedio de reacción y las características de los más habituales intermedios que se presentan en las reacciones orgánicas, poniendo el acento en la valencia del carbono, el número de electrones que presentan, etc. Reconocer las ligeras diferencias en los conceptos de oxidación y reducción en Química Orgánica en relación con la Química Inorgánica. Distinguir entre los conceptos de nucleófilo y electrófilo y aprender a relacionarlos y diferenciarlos de los de base y ácido, respectivamente. Reconocer el carácter polar de ciertos enlaces así como los efectos inductivo y resonante que ejercen ciertos átomos o grupos de átomos y las consecuencias que de estos efectos pueden derivarse en relación con la estabilidad y la reactividad de diversas especies orgánicas. Aprender a escribir estructuras de Lewis para moléculas neutras así como iones y tener en cuenta que una molécula neutra puede tener una estructura de Lewis con separación neta de carga, aunque la suma total de cargas sea nula, lo que permite introducir el concepto de carga formal así como su cálculo. Finalmente, se aprenderá a representar las moléculas orgánicas mediante fórmulas de Kekulé, condensadas y de esqueleto.

REACTIVIDAD. CONCEPTOS BÁSICOS

1.- CLASIFICACIÓN DE LAS REACCIONES ORGÁNICAS

(A). Variación del esqueleto carbonado

(A.1). Adiciones; (A.2). Eliminaciones; (A.3). Sustituciones; (A.4). Transposiciones;
(A.5). Condensaciones; (A.7). Degradaciones (A.8). Inserciones

(B). Modos de Formación y Ruptura de Enlaces

(B.1). Homolíticas; (B.2). Heterolíticas; (B.3) Concertada; (B.4). Por etapas

(C). Transferencia de electrones: Reacciones Redox

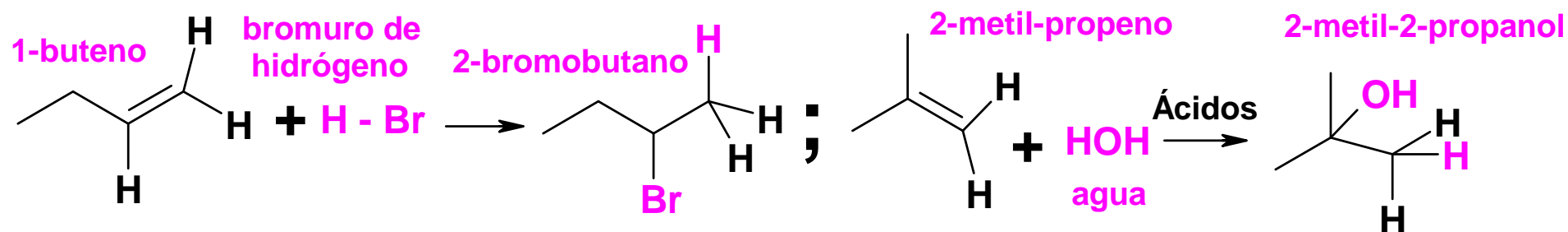
(C.1). Reacciones de Oxidación; (C.2) Reacciones de Reducción;
(C.3). Grado de Oxidación

(D). Reacciones Nucleófilas y Electrófilas.

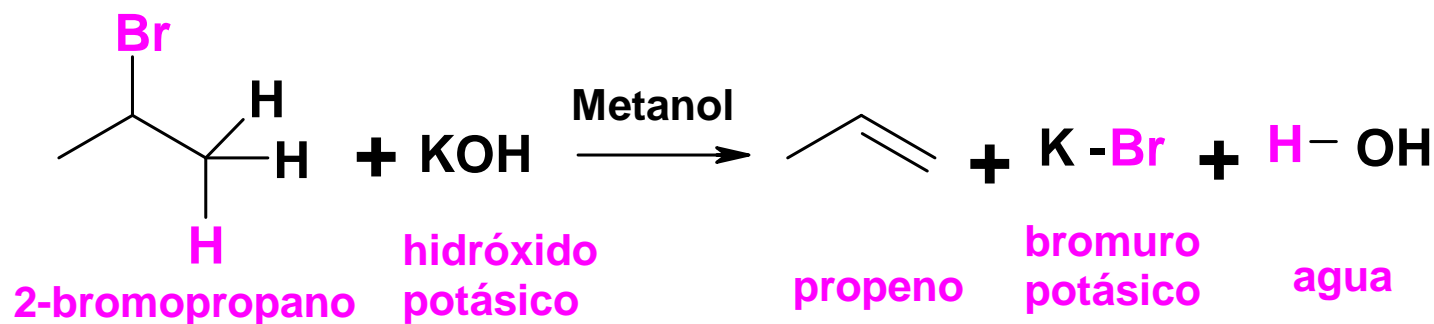
(D.1) Concepto de base y nucleófilo; (D.2) Diferentes tipos de nucleófilos y bases.
(D.3) Conceptos de ácido y electrófilo. (D.4) Escala de pK_A de acidez.

(A) . Variación del esqueleto carbonado

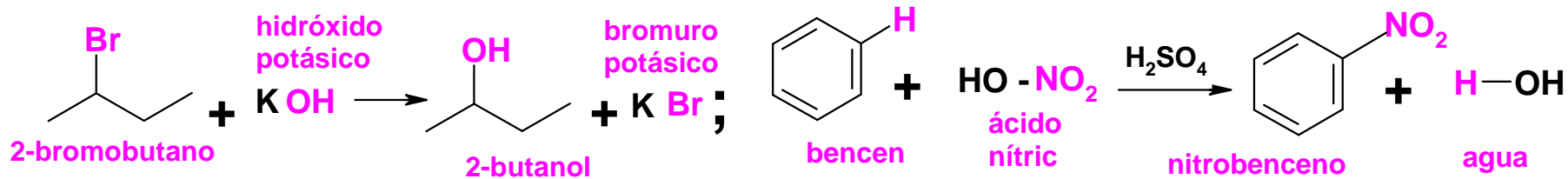
(A.1) Adiciones



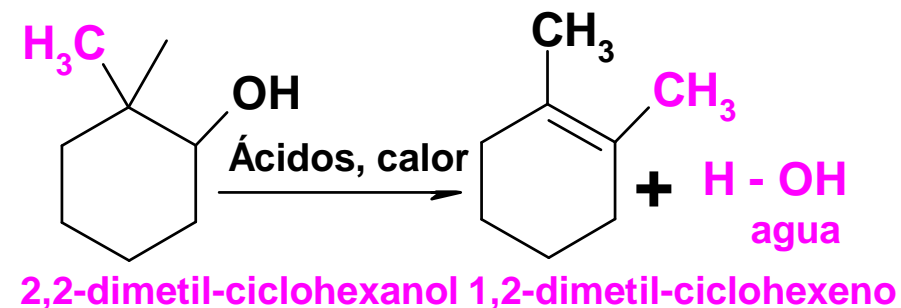
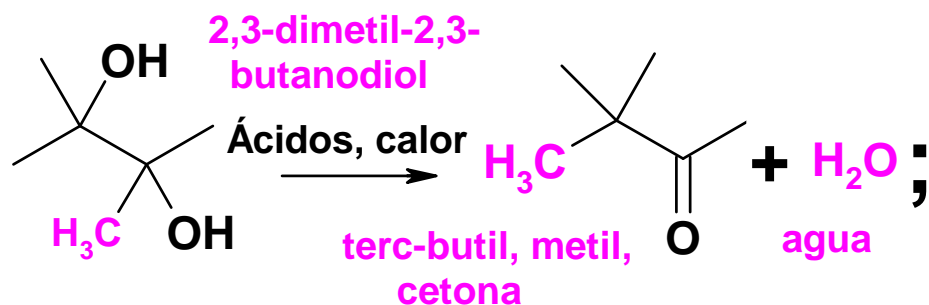
(A.2) Eliminaciones



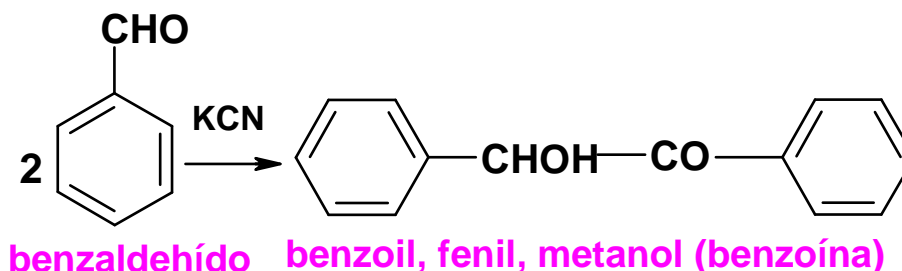
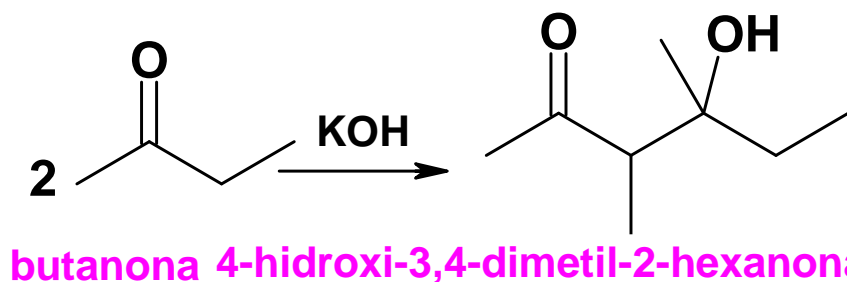
(A.3) Sustituciones



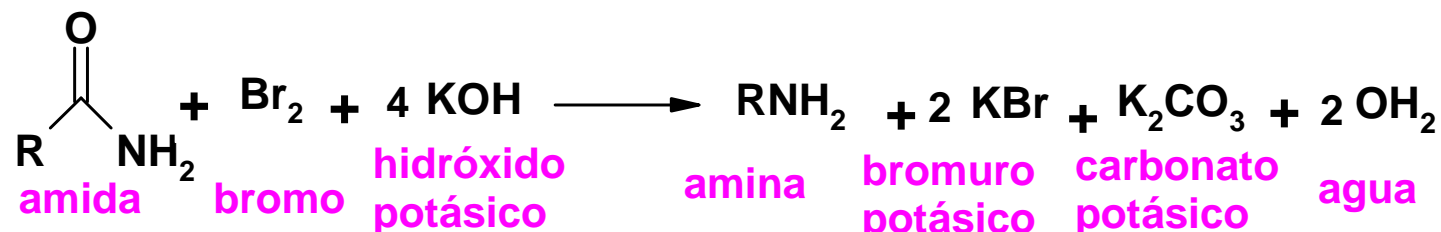
(A.4) Transposiciones o Reagrupamientos



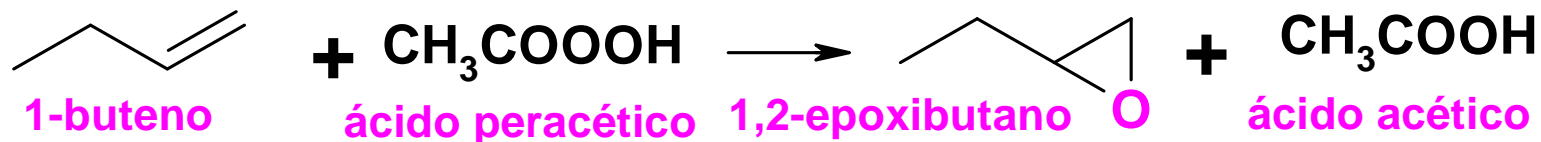
(A.5) Condensaciones



(A.6) Degradaciones (Degradación de Hofmann)

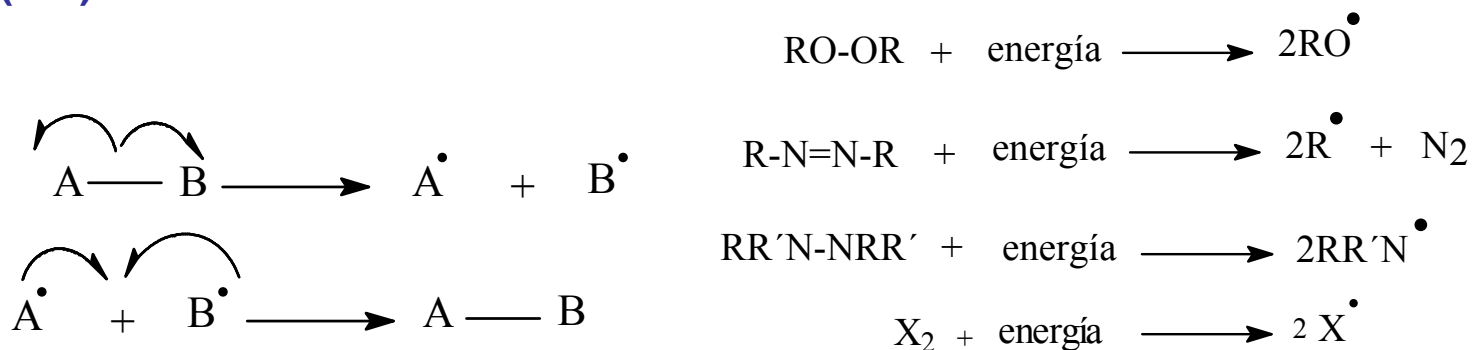


(A.7) Inserciones (Epoxidación)

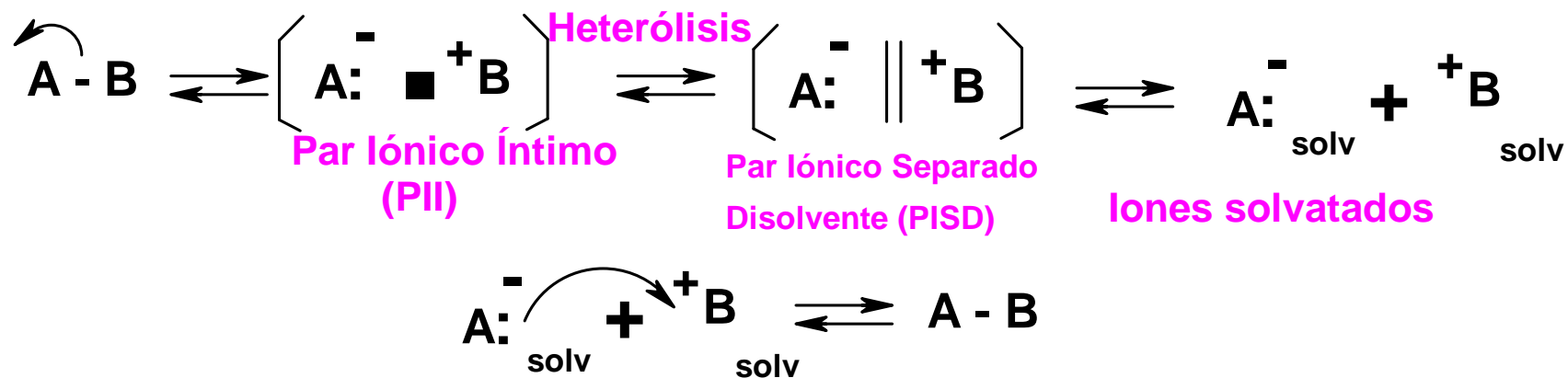


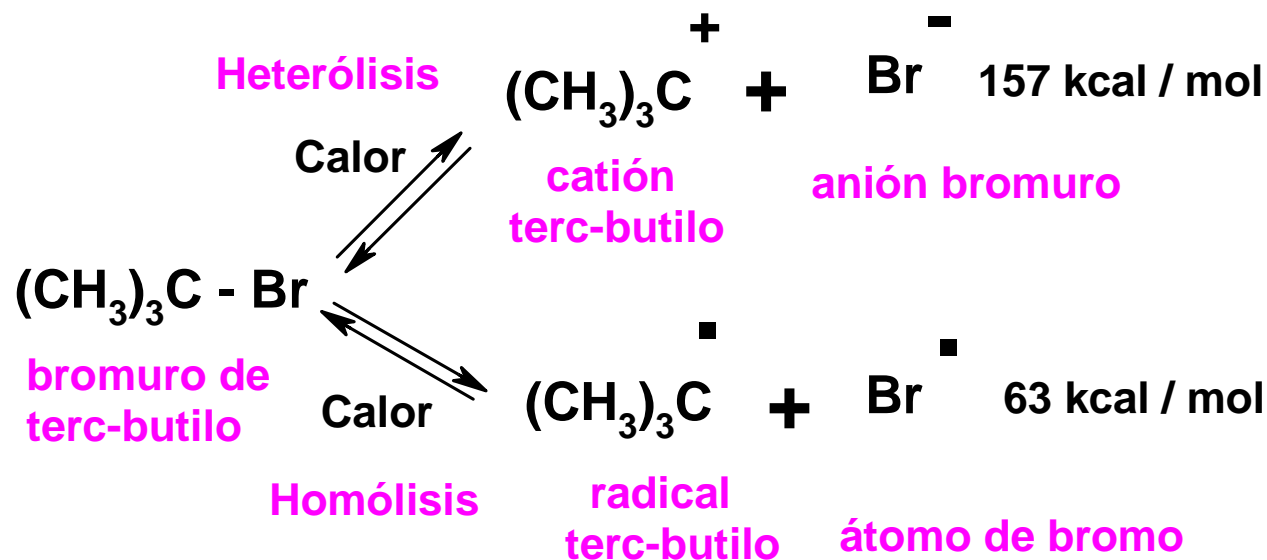
(B). Modos de Formación y Ruptura de Enlaces

(B.1). Reacciones Homolíticas



(B.2). Reacciones Heterolíticas





Para conseguir la ruptura heterolítica de un enlace deben cumplirse varias condiciones: (a) que la energía de enlace entre los dos átomos no sea muy elevada (b) que el enlace sea entre dos átomos de muy diferente electronegatividad (c) que uno de ellos sea muy apto para soportar la carga negativa (d) efectuar la reacción en un disolvente prótico y polar. Es necesario que se cumplan todas estas condiciones a la vez, porque la ruptura homolítica de un enlace está mucho más favorecida que la heterolítica. El papel del disolvente para favorecer la ruptura heterolítica del enlace lo estudiaremos más adelante con más detalle. Si tratamos de romper un enlace por vía térmica o utilizando energía radiante, la ruptura será siempre de modo homolítico y no heterolítico.

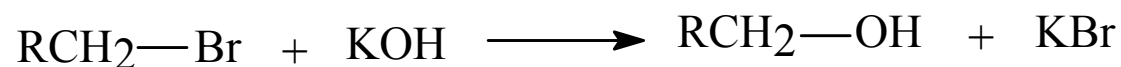
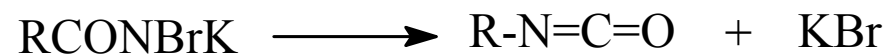
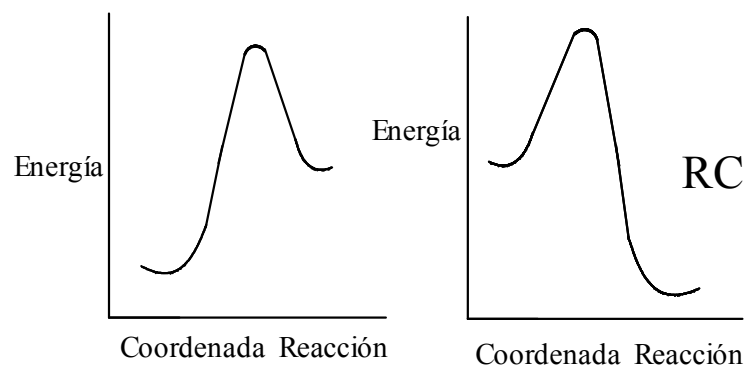
Energías de Disociación de enlace (kcal/mol)

Enlace	Kcal/mol	Enlace	Kcal/mol	Enlace	Kcal/mol
H - F	138	O - H	111	C - F	116
H - O	111	O - P	95	C - H	98
D - D	106	O - Si	88	C - O	86
H - H	104	O - C	86	C - C	83
H - Cl	103	O = C	176	C - Cl	81
H - N	94	O = N	145	C - N	73
H - C	98			C - Br	68
H - Br	88			C = O	176
H - S	83			C = C	146
H - P	76			C ≡ C	200
H - I	71	P - P	51	C ≡ N	213
C - Cl	58	O - F	45	D - D	106
S - S	54	Br - Br	46		
O - N	53	Si - Si	42		
O - Cl	52	I - I	36		
C - I	51	O - O	35		

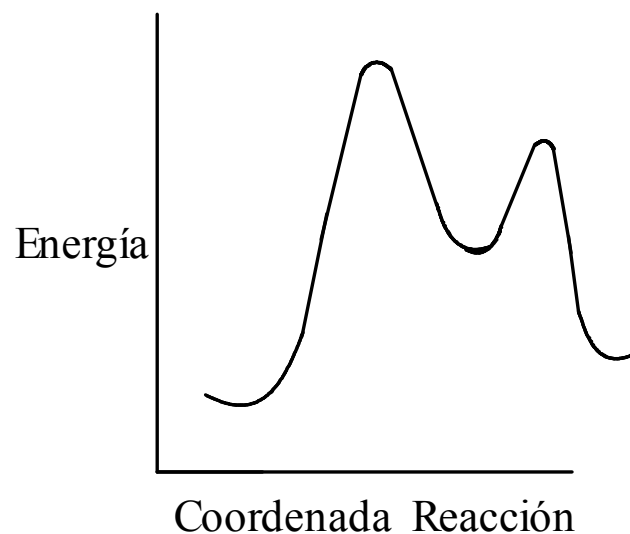
Energías de Disociación de enlace (kcal/mol)

Enlace C - H	Kcal/mol	Enlace C - C	Kcal/mol	Enlace C - X	Kcal/mol
$\text{H}_3\text{C} - \text{H}$	104	$\text{H}_3\text{C} - \text{CH}_3$	88	$\text{H}_3\text{C} - \text{Cl}$	84
$\text{CH}_3\text{H}_2\text{C} - \text{H}$	98	$\text{CH}_3\text{H}_2\text{C} - \text{CH}_3$	85	$\text{CH}_3\text{H}_2\text{C} - \text{Cl}$	81,5
$(\text{CH}_3)_2\text{HC} - \text{H}$	95	$(\text{CH}_3)_2\text{HC} - \text{CH}_3$	84	$(\text{CH}_3)_2\text{HC} - \text{Cl}$	81
$(\text{CH}_3)_3\text{C} - \text{H}$	91	$(\text{CH}_3)_3\text{C} - \text{CH}_3$	81	$(\text{CH}_3)_3\text{C} - \text{Cl}$	79
$(\text{H}_4\text{C}_5)\text{C} - \text{H}$	103	$\text{PhCH}_2 - \text{CH}_3$	72	$\text{H}_3\text{C} - \text{Br}$	70
$\text{H}_2\text{C} = \text{HC} - \text{H}$	103	$\text{CH}_2 = \text{CH} - \text{H}_2\text{C} - \text{CH}_3$	72	$\text{CH}_3\text{H}_2\text{C} - \text{Br}$	69
$\text{HC} \equiv \text{C} - \text{H}$	125			$(\text{CH}_3)_2\text{HC} - \text{Br}$	68
$\text{H}_5\text{C}_6\text{H}_2\text{C} - \text{H}$	85			$(\text{CH}_3)_3\text{C} - \text{Br}$	65
$\text{H}_2\text{C} = \text{CH}_2\text{C} - \text{H}$	87			$(\text{CH}_3)_3\text{C} - \text{I}$	50

(B.3). Reacciones Concertadas



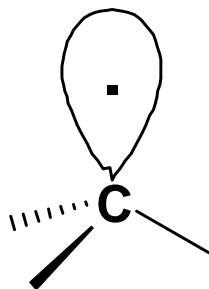
(B.4). Reacciones por Etapas



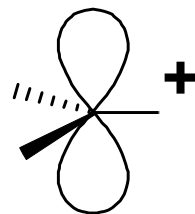
Reacción endotérmica en dos etapas, de las cuales la primera es la etapa lenta. Hay dos estados de transición y una especie intermedia.

Nº Intermedios = Nº Estados Transición – 1

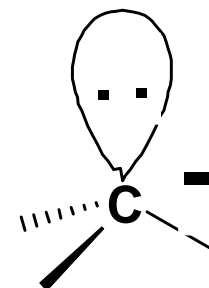
TIPOS FUNDAMENTALES DE INTERMEDIOS



Radical libre, 7 electrones
Neutro, C trivalente, geometría
piramidal, 1 orbital con 1e
desapareado. C sp^3 ; sp^2 en
alílicos y bencílicos



Carbocación, 6 electrones
Cación, C sp^2 trivalente,
geometría plana,
1 orbital p vacío.



Carbanión, 8 electrones,
Anión, C trivalente, geometría
piramidal, 1 orbital sp^3 con 2
electrones apareados. C sp^2
en alílicos y bencílicos

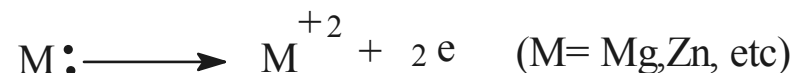
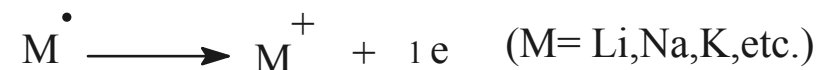
(C).- REACCIONES REDOX

Oxidación y Reducción equivalen a pérdida y ganancia de electrones, respectivamente.

Reductores y Oxidantes son aquellos reactivos que son fácilmente oxidados y reducidos, respectivamente.

Los oxidantes se reducen y los reductores se oxidan.

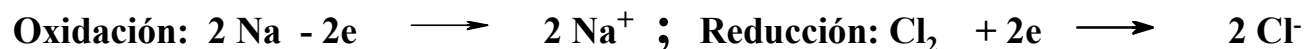
Reacciones de Oxidación



Reacciones de Reducción



Oxidante Reductor



Número de Oxidación en Compuestos Orgánicos

Alcanos $\text{C}_n \text{H}_{(2n+2)}$; N° Oxidación = x ; $(2n + 2) \cdot 1 + n \cdot x = 0$; $x = - (2n + 2) / n = - 2 - 2 / n$

Alquenos $\text{C}_n \text{H}_{2n}$; N° Oxidación = x ; $(2n) \cdot 1 + n \cdot x = 0$; $x = - 2$

Alquinos $\text{C}_n \text{H}_{(2n-2)}$; N° Oxidación = x ; $(2n - 2) \cdot 1 + n \cdot x = 0$; $x = (2-2n)/n = (2/n) - 2$

Conclusión: Este concepto no es útil en Química Orgánica pues conduce al absurdo de números fraccionarios y además a diferentes números de oxidación para compuestos pertenecientes a la misma familia.

Compuestos de Grado de Oxidación Cero

Alcanos [$C_n H_{(2n+2)}$]; Organometálicos (R-Li; alquil litio) (RMgX; magnesianos) (R_2CuLi ; dialquilcupratos de litio) (R_2Cd , dialquilcadmio, etc.)

Compuestos de Primer Grado de Oxidación

Alquenos ($C_n H_{2n}$); Haluros de alquilo (RX; ArX); Alcoholes (ROH); [Aminas (RNH_2 ; R_2NH ; R_3N); Tioles (Mercaptanos) (RSH); Hemiacetales [$RCH_2(OR')$].

Compuestos de Segundo Grado de Oxidación

Alquinos [$C_n H_{(2n-2)}$]; Aldehídos ($RCH=O$); Cetonas ($RR'C=O$); Dihaluros geminales ($RCHX_2$); Dioles geminales [$RCH(OH)_2$]; Acetales [$RCH(OR')_2$]; Haluros de vinilo ($RCH=CHX$); Enoléteres ($RCH=CHOR'$).

Compuestos de Tercer Grado de Oxidación

Ácidos carboxílicos (RCOOH); Haluros de ácido (RCOX); Anhídridos de ácido (RCO-O-COR'); Ésteres (RCOOR'); Amidas ($RCONH_2$; $RCONHR'$; $CONR_2$); Trihaloalcanos geminales (RCX_3); Dihaluros de vinilo ($RCH=CX_2$); Haluros de alquinilo ($RC\equiv CX$); Cetonas ($RC=C=O$); Nitrilos ($RC\equiv N$).

Compuestos de Cuarto Grado de Oxidación

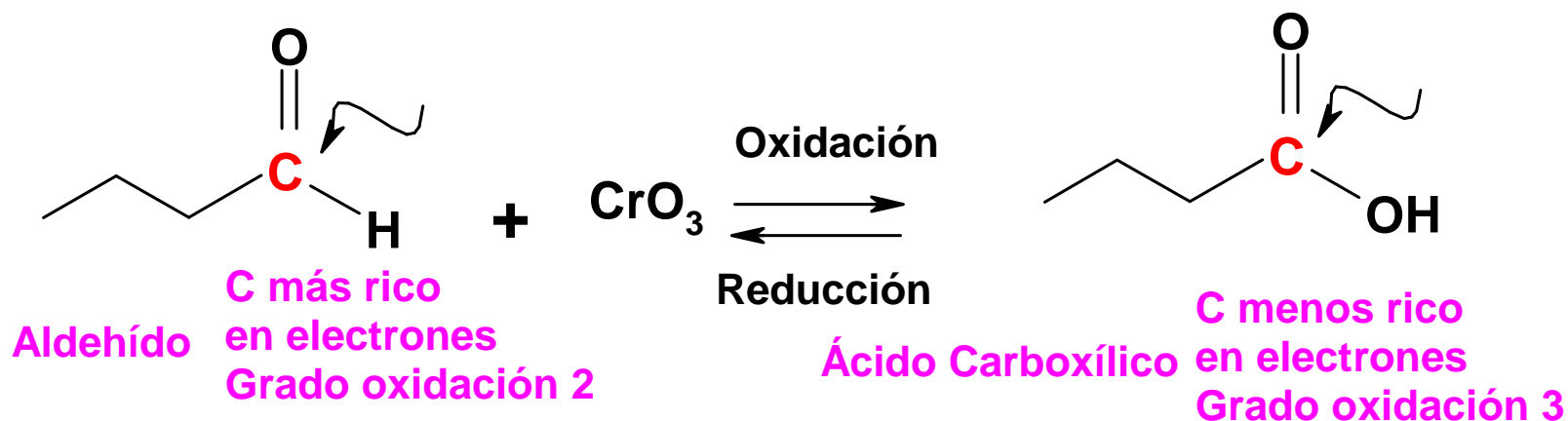
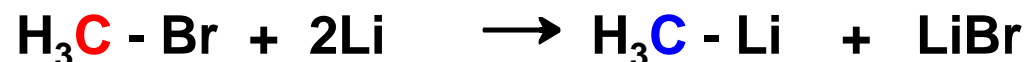
Tetrahaluros de carbono (CX_4); Dióxido de carbono (CO_2); Carbamatos de alquilo (RO-CO-OH); Carbonatos de dialquilo (RO-CO-OR'); Ureas ($RNH-CO-NHR'$); Bromuro de cianógeno ($Br-C\equiv N$); Isocianatos ($RN=C=O$).

Oxidación es el paso de una forma de menor a mayor grado de oxidación.

Reducción es el paso de una forma de mayor a menor grado de oxidación.

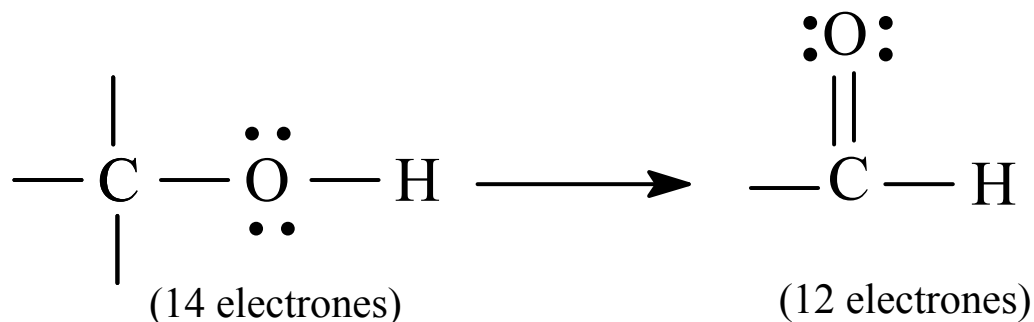
Consecuencias del cambio en el grado de oxidación

- 1º) Cambio (en ocasiones cuantitativo y en otras sólo cualitativo) en el sentido de polarización del enlace. Así, por ejemplo, cuando el CH_3Br se convierte en CH_3Li (se reduce pues pasa de primer grado de oxidación a grado cero), el carbono pasa de deficiente a rico en electrones (cambio cualitativo). Cuando el etanal se convierte en ácido etanoico (oxidación), el carbono unido al oxígeno es deficiente en ambos compuestos, pero es más deficiente en el ácido.



- 2º) Cambios en el grado de oxidación del átomo de carbono, que aumenta en las oxidaciones y disminuye en las reducciones. Así, en la conversión del bromuro de metilo en metilitio, se pasa de primer grado a grado cero, o sea hay una reducción, mientras que en la transformación del etanal en etanoico se pasa de segundo a tercer grado, es decir, es una oxidación.
- 3º) Ganancia o Pérdida de electrones en las Reducciones y Oxidaciones, respectivamente, que no siempre se aprecia.

(Oxidación) (14 electrones) $\text{CH}_3\text{OH} \longrightarrow \text{HCHO}$ (12 electrones)



(Reducción) (12 electrones) $\text{CH}_2 = \text{CH}_2 + \text{H}_2 \longrightarrow \text{CH}_3\text{-CH}_3$ (14 electrones)

(Oxidación) (8 electrones) $\text{CH}_3\text{-H} + \text{Br}_2 \longrightarrow \text{CH}_3\text{-Br}$ (8 electrones) + H-Br

(Reducción) (8 electrones) $\text{CH}_3\text{-Br} + \text{Mg} \longrightarrow \text{CH}_3\text{-Mg-Br}$ (8 electrones)

(D). Reacciones Térmicas y Fotoquímicas

Son **Reacciones Térmicas** aquellas que se llevan a cabo por el aporte de calor, mientras que se conocen como **Reacciones Fotoquímicas** aquellas que se efectúan por el aporte de energía radiante, particularmente luz visible y ultravioleta

La energía contenida en una radiación de longitud de onda λ viene dada por la expresión:

$$\Delta E = h\nu = hc / \lambda; \Delta E = 28,26 \cdot 10^4 / \lambda \text{ (Kcal/mol) } (\lambda \text{ en \AA ngstrom})$$

Clasificación de las Reacciones Heterolíticas:

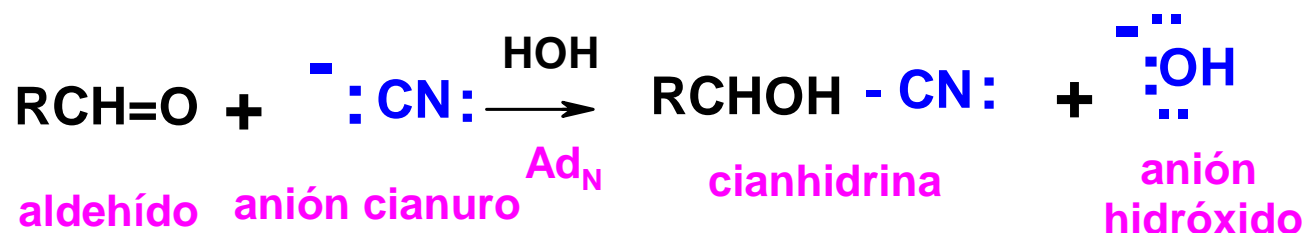
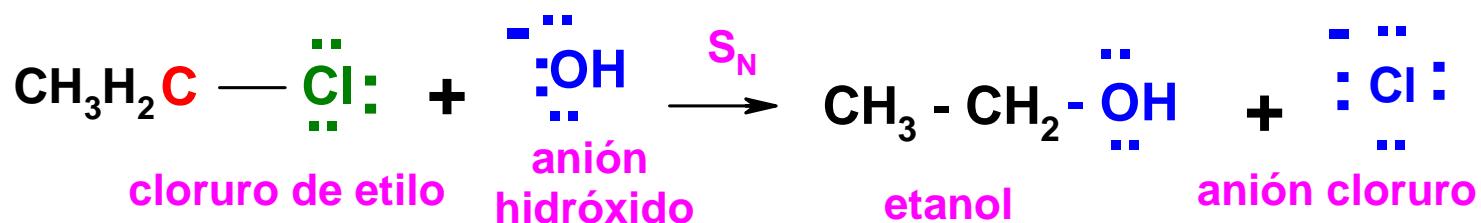
Reacciones Nucleófilas y Electrófilas

Se conocen como **Reacciones Nucleófilas** aquellas reacciones en las que un reactivo rico en electrones busca átomos de carbono deficientes en electrones. **En estos procesos, los electrones necesarios para crear un nuevo enlace los aporta el reactivo.**

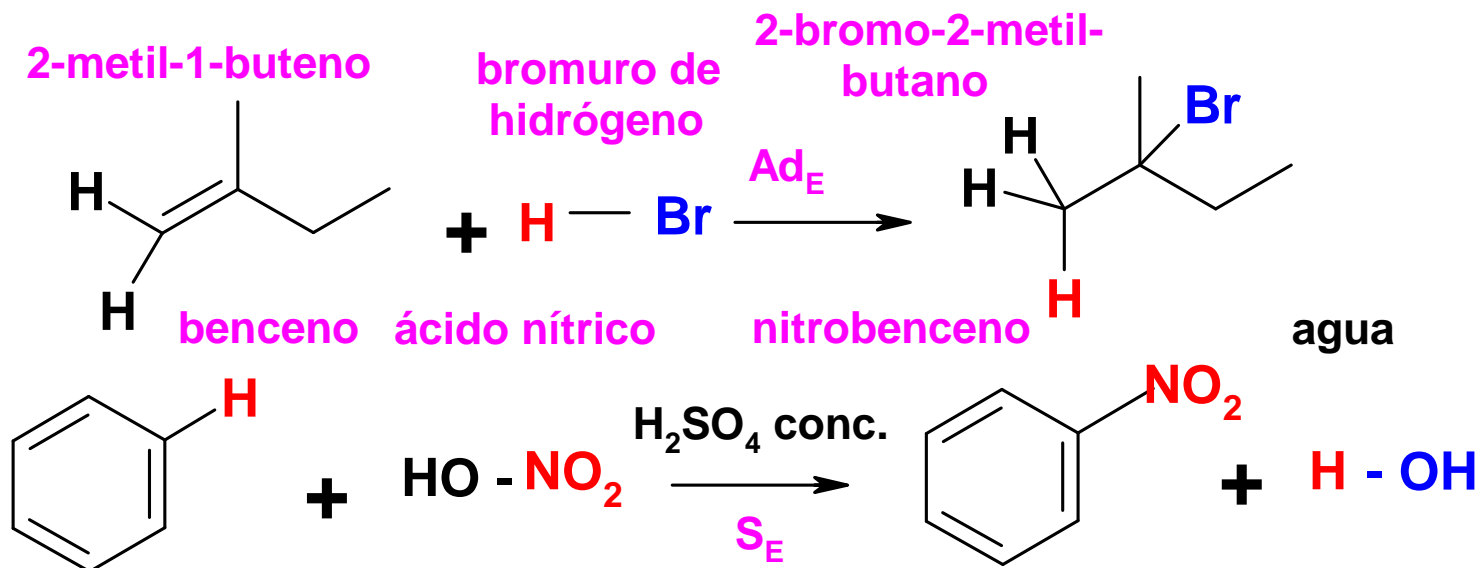
Se conocen como **Reacciones Electrófilas** aquellas reacciones en las que un reactivo pobre en electrones busca átomos de carbono ricos en electrones. **En estos procesos, los electrones necesarios para crear un nuevo enlace los aporta el sustrato.**

A continuación se muestran dos ejemplos de reacciones nucleófilas, la primera de las cuales es una reacción de Sustitución Nucleófila (S_N) y la segunda una Adición Nucleófila (Ad_N):

Reacciones Nucleófilas



Mostramos a continuación dos ejemplos de reacciones electrófilas, la primera de las cuales es una Adición Electrónica (Ad_E) y la segunda una Sustitución Electrónica (S_E):

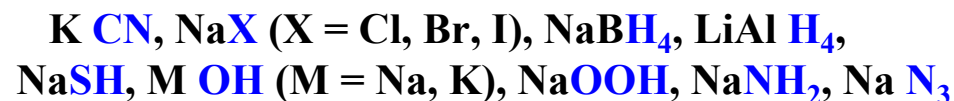


Reactivos Nucleófilos: sus tipos

Nucleófilos son aquellos reactivos que tienen pares electrónicos capaces de ser compartidos. **Nucleófilo** se corresponde cualitativamente con **Base de Lewis** y más lejanamente con **Reductor**. Los tipos más importantes de Nucleófilos son:

1.- Moléculas neutras poseedoras de electrones sin compartir (oxígeno, nitrógeno, halógeno, azufre, etc.), cuya nucleofilia es extraordinariamente baja.

2.- Aniones típicamente inorgánicos como cianuro, haluros, hidruros, hidrógeno sulfuro, hidróxido, hidroperóxido, amiduro, azida, etc.



3.- Aniones orgánicos como enolatos, carbaniones, carboxilatos, tiolatos, alcóxidos, amiduros derivados de aminas, etc.



4.- Moléculas inorgánicas neutras con heteroátomos (átomos diferentes del carbono) poseedores de pares electrónicos sin compartir como agua, peróxido de hidrógeno, amoníaco, hidroxilamina, hidracina, fosfina, etc.



5.- Moléculas orgánicas neutras con heteroátomos como alcoholes, éteres, aminas, hidroxilaminas, hidracinas, fosfinas, etc.



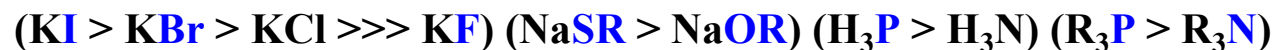
Reactivos Nucleófilos: comparación cualitativa

Nucleófilo corresponde cualitativamente bien con Base pero no cuantitativamente. Dicho de otro modo, todos los nucleófilos son bases y todas las bases son nucleófilos, pero no puede afirmarse que las bases más fuertes son los más potentes nucleófilos. La falta de correspondencia se debe a que un nucleófilo busca átomos de carbono mientras que una base busca átomos de hidrógeno. No obstante, pueden hacerse algunas afirmaciones generales en torno a la fuerza de los nucleófilos:

1.- Las bases conjugadas son nucleófilos más potentes que los ácidos de que derivan. Así, el anión hidróxido es más fuerte que el agua, los alcóxidos que los alcoholes, los tiolatos que los tioles, los amiduros que las aminas, etc.



2.- La nucleofilia aumenta al descender dentro de una familia. Así, los yoduros son más potentes que los bromuros, éstos más que los cloruros y éstos muchísimo más que los fluoruros. De igual modo los tiolatos son mejores nucleófilos que los alcóxidos, la fosfina que el amoníaco, las fosfinas que las aminas, etc.:



3.- La nucleofilia dentro de un periodo disminuye al desplazarse hacia la derecha siempre que se comparen especies similares (neutras con neutras o cargadas con cargadas, nunca neutras con cargadas). Así, los carbaniones son mejores nucleófilos que los amiduros y éstos más que los haluros:



4.- Los aniones derivados de los ácidos minerales muy fuertes son muy poco nucleófilos. Así, los aniones perclorato, clorato, clorito, nitratos, sulfato, sulfito, hidrógeno sulfato, fosfato, hidrógeno fosfato, etc., lo que se debe probablemente a su elevado tamaño y a la dispersión de la carga por resonancia:

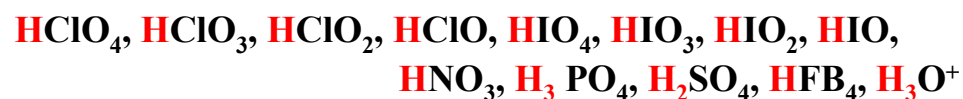


5.- La nucleofilia de una especie es fuertemente dependiente del disolvente en que se halla disuelta. Cuanto mejor solvatado esté el nucleófilo peor será su nucleofilia.

Reactivos Electrófilos: sus tipos

Electrófilos son aquellos reactivos que poseen su última capa electrónica sin rellenar y por ello son capaces de aceptar pares electrónicos de otro átomo dador de electrones. En otras palabras, los electrófilos poseen un orbital vacante y por ello son capaces de aceptar pares de electrones. **Electrófilo** se corresponde cualitativamente con **Ácido de Lewis** y más lejanamente con **Oxidante**. Los tipos más importantes de electrófilos son:

1º.- Los ácidos minerales fuertes de Brönsted-Lowry, que en medio acuoso se disocian casi por completo dando origen al catión hidronio. Entre estos ácidos citaremos al perclórico, clórico, cloroso, hipocloroso, sus análogos en el bromo y yodo, el nítrico (que se comporta asimismo como un fuerte oxidante), el ortofosfórico, sulfúrico, tetrafluoroborico, etc. En medio acuoso todos se igualan en fuerza porque se convierten en el catión hidronio:



2º.- **Ciertos compuestos orgánicos que se comportan como Ácidos de Brönsted-Lowry entre los que citaremos a los ácidos carboxílicos, los ácidos sulfónicos, ciertos fenoles, etc.:**

RCOOH; RSO₃H (R = Me; p-MePh), ArOH (Ar = 2,4,6-trinitrofenilo)

3º.- **Salas minerales de metales que poseen un heteroátomo no metálico o tipo metálico, que presentan un orbital vacante y que por ello son capaces de actuar como Ácidos de Lewis aceptando un par electrónico.** Entre otros citaremos, el trifluoruro de boro, los alquilboranos, los trihaluros de aluminio, los trialquilalanos, los trihaluros de hierro (III), el tetracloruro de estaño, el cloruro de cinc, el acetato de talio (III), el tetracloruro de titanio, cloruro de mercurio (I) y (II), nitrato de plata, etc.:

**BF₃, R₃B, AlX₃, AlR₃, FeX₃, TiX₃, SnCl₄, ZnCl₂,
Ti(OAc)₃, TiCl₄, HgCl, HgCl₂, AgNO₃**

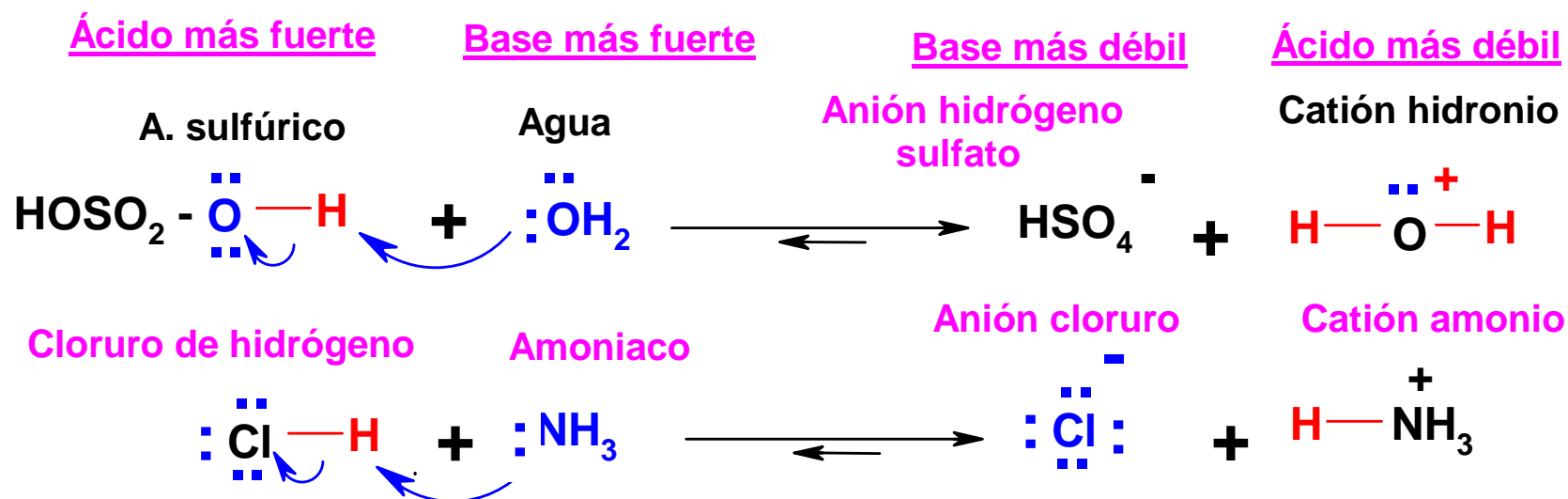
4º.- **Especies orgánicas intermedias deficientes en electrones como radicales libres y carbocationes con estabilidad suficiente,** tales como radical trifenilmetilo (tritilo), radicales terciarios como el terc-butilo, radicales bencílicos como el bencilo, cationes bencílicos como el trifenilmetilo (tritilo), cationes terciarios como el terc-butilo, etc.:

Ph₃C[·]; Me₃C[·]; PhH₂C[·]; Ph₃C⁺, Me₃C⁺

Debe notarse que la interacción entre un nucleófilo y un electrófilo se efectúa cediendo el primero un par electrónico que se sitúa en el orbital vacante del segundo (el electrófilo), formándose un enlace covalente dativo entre ambos. Este movimiento electrónico se simboliza por una flecha de doble punta (en color azul) dirigida desde el nucleófilo (el dador de electrones) hacia el electrófilo (el aceptor de electrones).

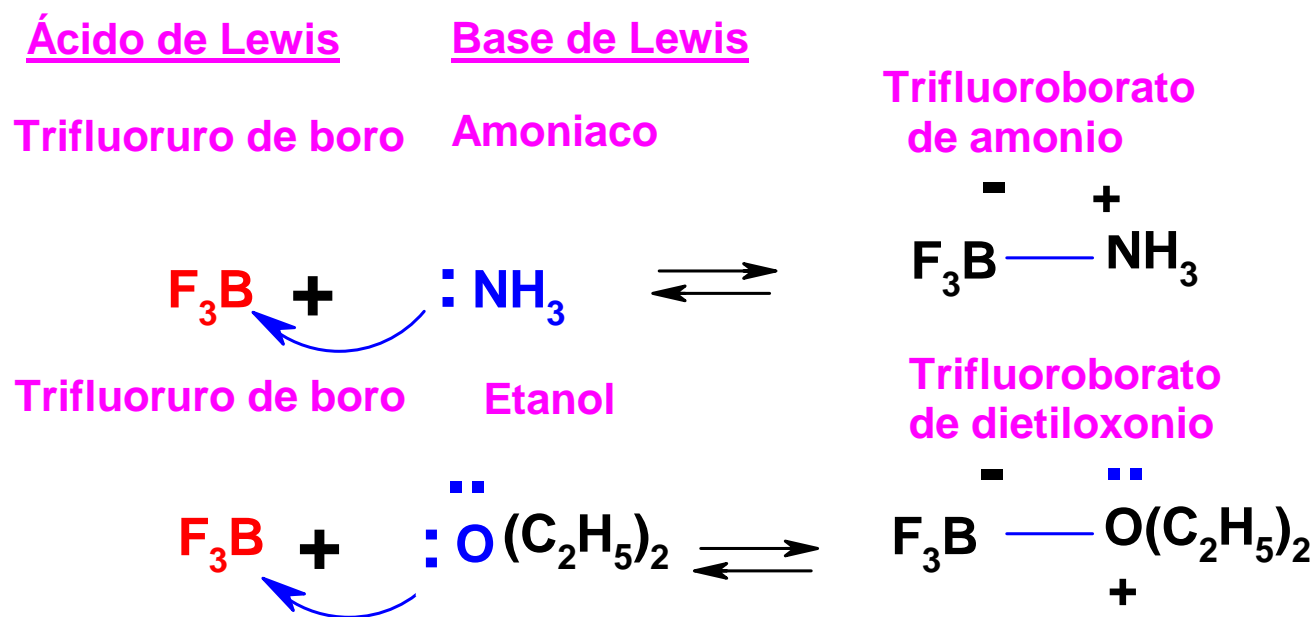
Ácidos y Bases de Brönsted-Lowry

Según Brönsted-Lowry, un ácido es una sustancia que dona un protón, mientras que una base es una sustancia que acepta un protón. De acuerdo con esta definición los ácidos deben tener hidrógeno lábil y una reacción ácido-base en esta definición implica la formación de un enlace entre el hidrógeno y generalmente un heteroátomo (O y N lo más habitualmente) poniendo la base el par electrónico para la formación de este enlace. Así, el ácido sulfúrico dona un protón al agua formando el catión hidronio y el anión hidrógeno sulfato y en otro ejemplo, el cloruro de hidrógeno gaseoso cede un protón al amoníaco para formar el anión cloruro y el catión amonio, es decir, cloruro de amonio. En ambos casos el equilibrio se halla muy desplazado hacia la derecha, pues tanto el catión hidronio como el amonio son los ácidos más débiles, en tanto que los aniones hidrógeno sulfato y cloruro son las más bases más débiles. En general, **los equilibrios ácido-base se hallan desplazados hacia la formación del ácido y la base más débiles:**

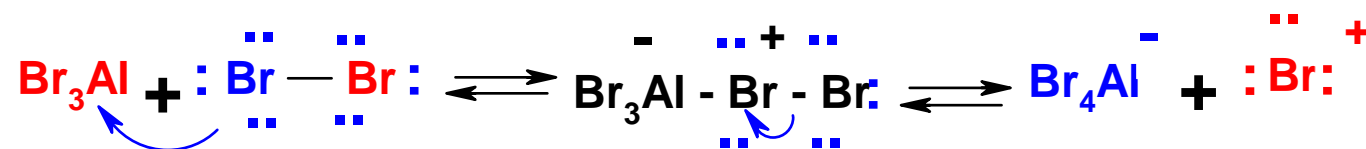


Ácidos y Bases de Lewis

Según Lewis un ácido es una sustancia que puede aceptar un par electrónico mientras que una base es una sustancia capaz de ceder un par electrónico. En esta definición una base debe tener un par de electrones sin compartir y un ácido un orbital vacante. Dicho de otro modo, una base es un donante de pares electrónicos y un ácido un aceptor de pares electrónicos; una reacción ácido-base queda reducida a la cesión de un par electrónico desde la base hasta el ácido, o dicho de otro modo, a la formación de un enlace covalente dativo entre la base y el ácido. Así, el trifluoruro de boro actúa como ácido frente al amoníaco formando trifluoroborato amónico y frente al etanol formando trifluoroborato de dietiloxonio. En ambos casos el BF_3 actúa como Ácido de Lewis aceptando un par del N y del O, respectivamente, que por lo tanto actúan como Bases de Lewis:

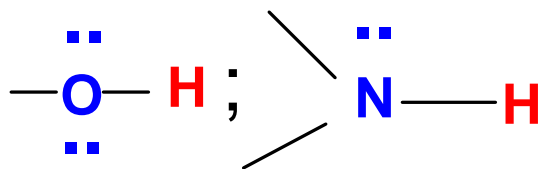


Otro ejemplo es la reacción entre el cloruro de aluminio y la molécula de bromo que forman un complejo a través de la cesión de un par electrónico desde el halógeno al aluminio:



Fuerza de los ácidos y bases

No todos los hidrógenos de una molécula son ácidos y **así se puede afirmar que sólo son claramente ácidos los H unidos a los átomos fuertemente electronegativos como el oxígeno y los halógenos**. Por esta razón, en Química Orgánica sólo son claramente ácidos los hidrógenos de los tipos siguientes:



Determinados ácidos ceden completa y fácilmente su H ácido en tanto que otros no lo hacen completamente, por lo que es necesario introducir una magnitud que permita medir y comparar la fuerza de los diferentes ácidos en medios acuosos. Esta magnitud es la constante de los equilibrios (K_A) de las reacciones ácido-base o mejor el $\text{p}K_A$:

$$\text{p}K_A = -\log K_A$$

Cuanto menor sea el $\text{p}K_A$ de un ácido mayor será su K_A y por lo tanto más fuerte será el ácido. Conviene tener en cuenta que si bien K_A no puede ser nula ni negativa, $\text{p}K_A$ si puede serlo. De hecho cuanto más negativa sea $\text{p}K_A$ más fuerte será el ácido.

Se pueden establecer algunas relaciones importantes en relación con la acidez de los hidrógenos unidos a diferentes tipos de átomos, que enunciaremos:

1º.- La acidez de un hidrógeno unido a un átomo A depende de la electronegatividad del átomo A y de su tamaño.

2º.- La acidez aumenta al aumentar la electronegatividad, de modo que dentro de un mismo periodo la acidez aumenta al desplazarse hacia la derecha cuando se comparan sustancias de tipos similares (neutras con neutras, cargadas con cargadas). Ello se debe a que en ese sentido aumenta la electronegatividad:



3º.- Dentro de una familia, la acidez aumenta al descender dentro de ella, pues se produce un incremento del tamaño. Así:



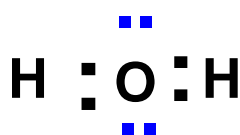
4º.- Entre los compuestos orgánicos sólo tienen acidez notable aquellos que contengan los grupos O - H, N - H y S - H, por este orden.

5º.- La acidez de los compuestos orgánicos que contienen H unidos al C, puede verse muy influenciada por la presencia sobre el C de grupos muy electronegativos. En general cuanto mayor número de sustituyentes atractores de electrones se hallen sobre un átomo de C, mayor será la acidez de un H unido a este carbono. Así, el cloroformo (Cl_3CH) es más ácido que el diclorometano (Cl_2CH_2) y este más que el cloruro de metilo (CH_3Cl).

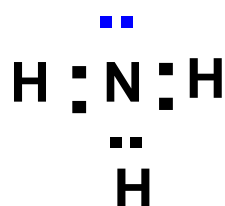
Estructuras de Lewis

Las estructuras de Lewis también conocidas como estructuras de electrón-punto se basan en representar los electrones de valencia de los átomos por medio de puntos y conviene advertir que los electrones sin compartir deben ser claramente señalados. A continuación mostramos algunos ejemplos de estructuras de Lewis de moléculas inorgánica y orgánicas:

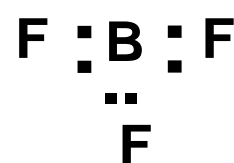
Agua



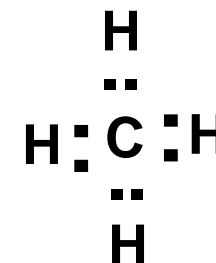
Amoniac



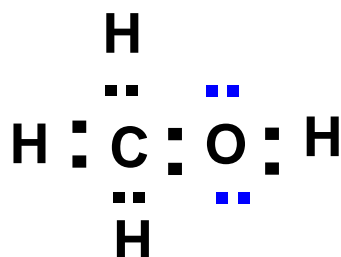
Trifluoruro de boro



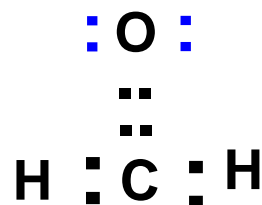
Metano



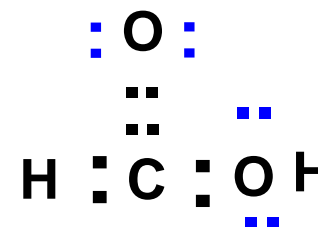
Metanol



Metanal



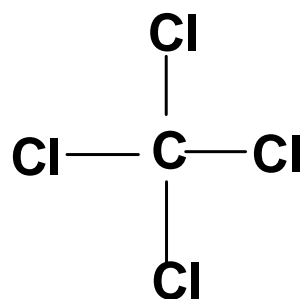
Ácido metanoico



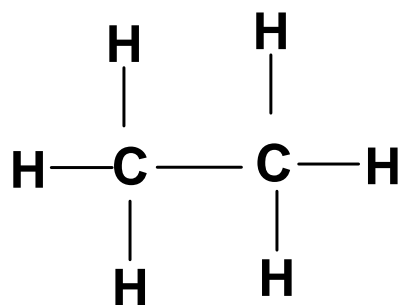
Estructuras de Kekulé o de enlace – línea

En este método los enlaces se representan por medio de una línea entre los átomos si se trata de un enlace sencillo, dos si es un enlace doble o tres si se trata de un triple enlace. Es frecuente no representar los electrones sin compartir aunque es conveniente acostumbrarse a hacerlo:

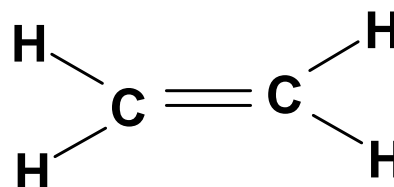
Tetracloruro
de carbono



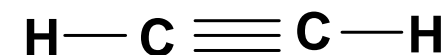
Etano



Eteno



Etino



Estructuras condensadas

En éstas se ignoran los enlaces entre los átomos escribiendo cada carbono con los grupos que lleva unidos:

Propano



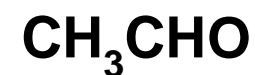
Bromuro de etilo



Etanol



Etanal

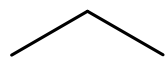


Ácido etanoico

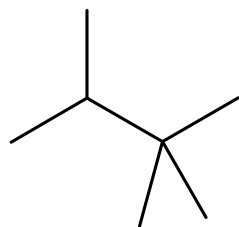


Estructuras de esqueleto

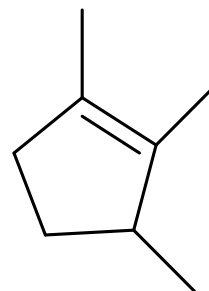
En este modo de representación llamado también fórmula lineoangular no se escriben los átomos que componen la molécula y los enlaces se representan por líneas admitiendo que en cada vértice hay un carbono con tantos hidrógenos como sean necesarios para completar la valencia cuatro del carbono. Los átomos de hidrógeno no se representan:



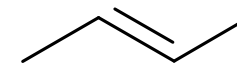
Propano



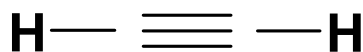
2,2,3-trimetil-butano



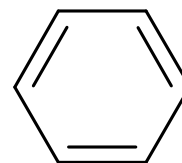
1,2,3-trimetil-ciclopenteno



2-buteno



Acetileno

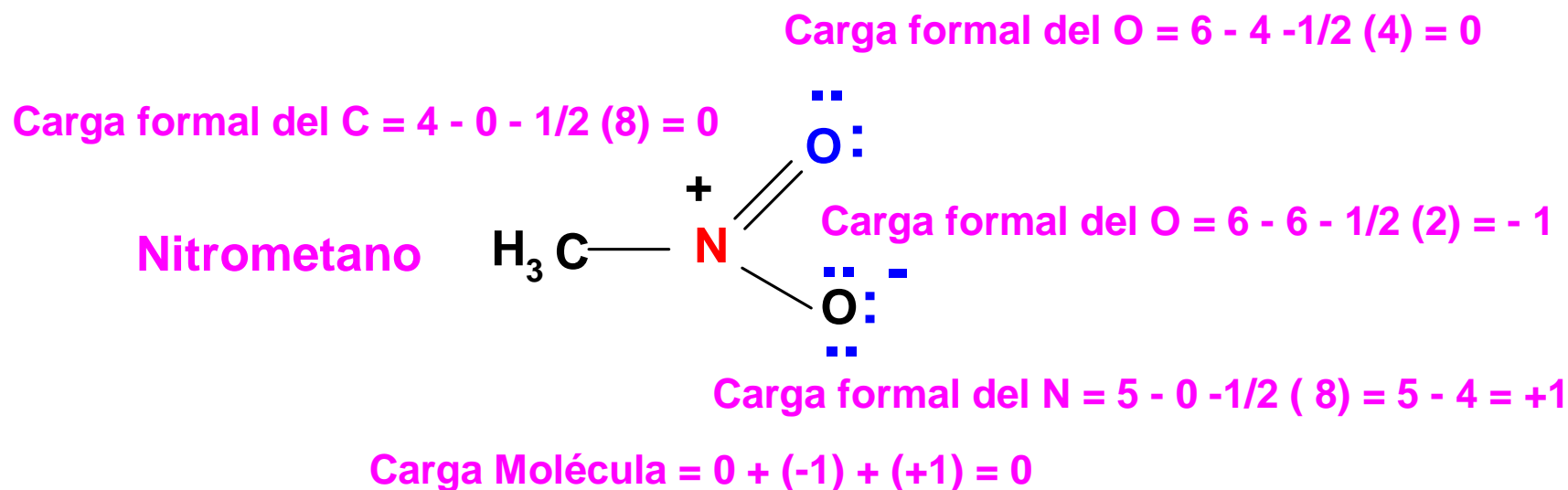


Benceno

Cargas formales

Al representar una molécula en ocasiones ciertos átomos aparecen con valencia anormal, es decir, diferente (mayor) de la habitual y por ello aunque la molécula sea globalmente neutra, debe representarse señalando sobre los átomos cargas parciales positivas o negativas. Conviene tener en cuenta que si estamos representando una molécula neutra, la suma de todas las cargas parciales deben ser cero. Así para el nitrometano, una molécula neutra, el C tiene carga formal cero, el N tiene carga positiva (+1), el O del doble enlace tiene carga cero (0) y finalmente, el O del enlace sencillo tiene una carga negativa (-1). En conjunto la molécula es neutra. La carga formal de cada átomo se calcula del siguiente modo:

$$\text{Carga Formal} = \text{N}^\circ \text{ Elect. Valencia} - \text{N}^\circ \text{ Elect. Sin Compartir} - (1/2) \text{N}^\circ \text{ Elect. Compartidos}$$



Compuesto	pK _A	Compuesto	pK _A	Compuesto	pK _A
CH ₃ C≡N ⁺ H	- 10,1	CH ₃ C(=O)NH ₂ ⁺	0,0	PhCOOH	4,2
H - I	- 10	CF ₃ COOH	0,2	p-Me-PhCOOH	4,3
H - Br	-9	CCl ₃ COOH	0,64	p-MeO-PhCOOH	4,5
CH ₃ CH=O ⁺ H	- 8	p-NO ₂ PhN ⁺ H ₃	1,0	PhN ⁺ H ₃	4,6
CH ₃ (C=O ⁺ H) CH ₃	- 7,3	Cl ₂ COOH	1,3	CH ₃ COOH	4,8
H - Cl	- 7	H SO ₄ ⁻	2,0	p-Me-PhN ⁺ H ₃	5,1
H SCH ₃	- 6,8	H ₃ PO ₄	2,1	C ₅ H ₅ N ⁺ H	5,3
CH ₃ (C=O ⁺ H)OCH ₃	- 6,5	FCH ₂ COOH	2,7	(CH ₃) ₂ C=N ⁺ HCH ₃	5,5
CH ₃ (C=O ⁺ H) OH	- 6,1	ClCH ₂ COOH	2,8	CH ₃ COCH ₂ CHO	5,9
H ₂ SO ₄	- 5	BrCH ₂ COOH	2,9	HON ⁺ H ₃	6,0
Et - O ⁺ H -Et	- 3,6	ICH ₂ COOH	3,1	H ₂ S	7,0
CH ₃ CH ₂ O ⁺ H ₂	- 2,4	H - F	3,2	p-NO ₂ Ph-O - H	7,1
CH ₃ O ⁺ H ₂	- 2,5	H - NO ₂	3,4	H ₂ PO ₄ ⁻	7,2
H ₃ O ⁺	- 1,7	p-NO ₂ PhCOOH	3,4	PhS - H	7,8
NO ₃ H	- 1,3	HCOOH	3,8	C ₃ H ₄ N ⁺ H ₂	8,0
H SO ₃ CH ₃	- 1,2	p-Br-PhNH ⁺ ₃	3,9	H ₂ NN ⁺ H ₃	8,1
H SO ₃ Ph	- 0,60	p-BrPhCOOH	4,0	CH ₃ CO ₃ H	8,2

Compuesto	pK _A	Compuesto	pK _A	Compuesto	pK _A
CH ₃ CH ₂ NO ₂	8,6	C ₅ H ₁₀ N ⁺ H ₂	11,1	H - C≡C - H	25
CH ₃ COCH ₂ COCH ₃	8,9	CH ₃ CH ₂ N ⁺ H ₃	11,2	CH ₃ C≡N:	25
H - C≡N:	9,1	C ₄ H ₈ N ⁺ H ₂	11,3	CH ₃ CONMe ₂	30
p-Cl-Ph - O - H	9,4	H PO ₄ ⁻²	12,3	NH ₃	36
⁺ NH ₄	9,4	CF ₃ CH ₂ O - H	12,4	C ₄ H ₈ N - H	36
HOCH ₂ CH ₂ ⁺ NH ₃	9,5	EtOCOCH ₂ COOEt	13,3	CH ₃ NH ₂	40
Ph - O - H	10,0	HC≡CCH ₂ O - H	13,5	PhCH ₃	41
p-Me-Ph - O - H	10,2	H ₂ NCONH ₂	13,7	C ₆ H ₆	43
H CO ₃ ⁻	10,2	CH ₃ - O - H	15,5	CH ₂ =CHCH ₃	43
CH ₃ NO ₂	10,2	H ₂ O	15,7	CH ₂ =CH ₂	44
p-NH ₂ -Ph - O - H	10,3	CH ₃ CH ₂ - O - H	15,9	C ₃ H ₆	46
CH ₃ CH ₂ S - H	10,5	CH ₃ CONH ₂	15,9	CH ₄	50
(CH ₃) ₃ N ⁺ H	10,6	PhCOOCH ₃	16,0	CH ₃ CH ₃	50
CH ₃ COCH ₂ COEt	10,7	C ₄ H ₄ NH	17		
CH ₃ N ⁺ H ₃	10,7	CH ₃ CHO	17		
C ₆ H ₁₁ N ⁺ H ₃	10,7	(CH ₃) ₃ C - O - H	18		
(CH ₃) ₂ N ⁺ H ₂	10,7	CH ₃ COOEt	24,5		