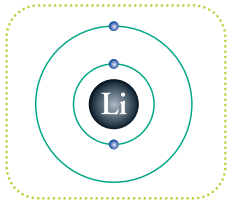
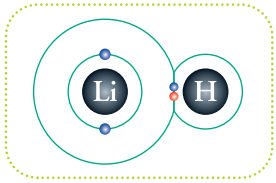
El siguiente elemento del grupo 1 es el litio (Li, período 2) de número atómico 3, por lo tanto las tres cargas positivas se compensan con 3 electrones. La mecánica cuántica explica el porqué se completa la primera capa con dos electrones y el tercero se ubica en una segunda capa, que va a ser la externa y que se considera completa con un solo electrón compartido.



Un compuesto conocido es el hidruro de litio (LiH), que lo representaríamos así:

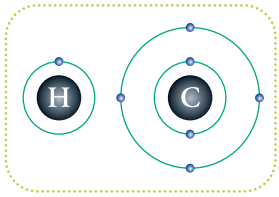


No profundizaremos en el comportamiento del grupo 1 más allá del período 2. Nos bastará recordar el comportamiento del hidrógeno ya que se trata de un elemento fundamental presente en la mayoría de las moléculas orgánicas.

Unión del carbono consigo mismo

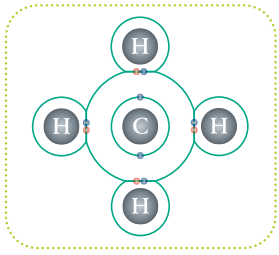
Hasta ahora hemos visto ejemplos de moléculas diatómicas, pero la fortaleza mayor del sistema presentado por Lewis es su capacidad de explicar complicados arreglos moleculares, tal como suelen ser las moléculas orgánicas de cinco o más átomos.

Veamos el caso del metano, cuatro átomos de hidrógeno por cada átomo de carbono. Éstas son las configuraciones electrónicas.



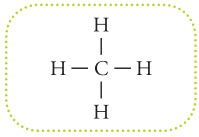
El carbono es el sexto elemento por lo tanto Z = 6 (6 protones en su núcleo) y para que sea electroneutro (sin carga eléctrica) debe ubicar 6 electrones, 2 en la capa interna y 4 en la externa.

La única forma de combinar cuatro átomos de hidrógeno satisfaciendo la regla del octeto y la configuración del hidrógeno es la que se muestra en el esquema.

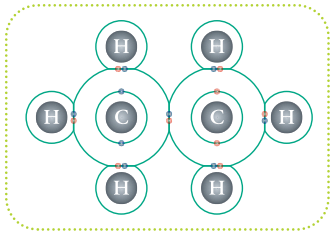


En el gráfico están representados con cruces los electrones de cada hidrógeno, sólo a los fines didácticos, pero de ninguna manera los electrones tienen identidad, es decir, que no se los puede distinguir en cuanto a su origen.

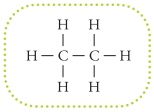
Podemos representar los pares electrónicos compartidos de esta molécula como sigue, un guión por cada par (si hubiera electrones no compartidos se los obvia en el esquema).

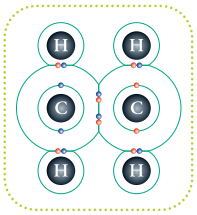


Veamos otro ejemplo, la molécula de etano que consta de 2 átomos de carbono y 6 de hidrógeno. Bien, ésta es la única forma de enlazar los átomos de forma tal que a ningún átomo le sobre o le falten electrones.



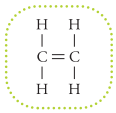
Nuevamente podemos representar los pares electrónicos compartidos de esta molécula como se visualiza en el esquema.



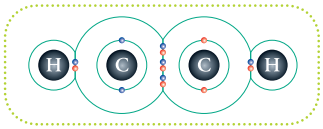


Existe una molécula llamada eteno que consta de dos átomos de carbono y 4 de hidrógeno, éste es su diagrama de Lewis.

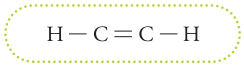
Como ahora hay dos pares de electrones compartidos entre los carbonos la representación en líneas será:



Como ejemplo del último caso del carbono combinado consigo mismo, está la molécula llamada acetileno o etino que contiene dos átomos de carbono y dos de hidrógeno.



Ahora hay tres pares de electrones compartidos entre los carbonos, la representación en líneas será:



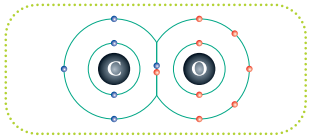
En resumen, el elemento carbono puede unirse de tres formas distintas consigo mismo. Esta característica lo convierte en el "ladrillo" central de toda molécula orgánica.

Unión del carbono con el oxígeno

Esta unión presenta dos casos. El del enlace simple, sólo un par de electrones compartidos y el del enlace doble, con dos pares de electrones compartidos.

Con un enlace simple

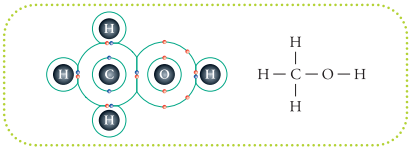
Podemos representar en forma general el primer caso así:



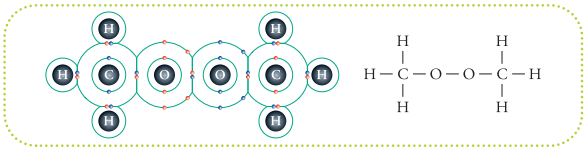
Observemos que al carbono le faltan 3 electrones para completar su octeto y al oxígeno le falta 1, esto quiere decir que el carbono se puede unir, como máximo, a tres elementos más y que el oxígeno se puede unir a un elemento más.

Ejemplos de este tipo de enlace entre el carbono y el oxígeno son los grupos funcionales[7] alcohol (cuando el oxígeno se une a un hidrógeno), peróxido (cuando el oxígeno a otro oxígeno) y éter (cuando el oxígeno se une a otro carbono).

Un ejemplo de alcohol es el metanol:

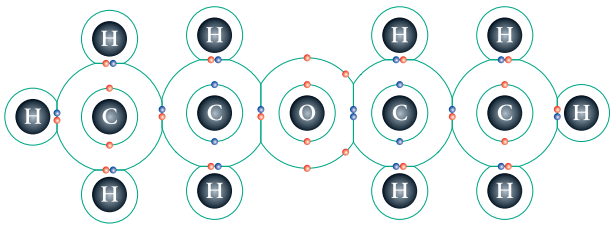


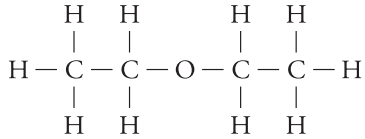
Un ejemplo de peróxido, es el dimetilperóxido:



[7] Llamamos grupo funcional a un grupo de átomos que, unidos siempre de una misma manera, puede considerársele como un módulo que puede estar presente en distintas moléculas, en general, con propiedades químicas similares.

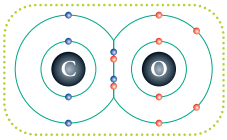
Un ejemplo de la función química éter es el dietileter o conocido también como éter etílico:





Con un enlace doble

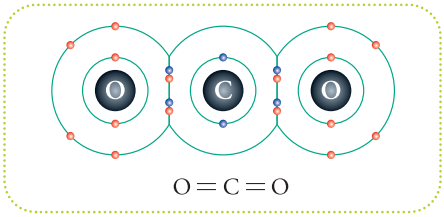
La otra forma en que el oxígeno puede satisfacer su octeto es compartiendo dos electrones con un átomo de carbono, en forma general.



Esa forma de enlace entre el carbono y el oxígeno se conoce con el nombre de carbonilo en el caso de que el carbono establezca además dos enlaces simples. Se suele mencionar al carbono de este grupo funcional como "carbono carbonílico" y al oxígeno, como "oxígeno carbonílico".

Notemos que, solo, el carbono puede formar enlaces, es decir, debe completar su octeto.

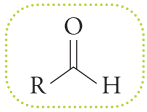
Como tiene dos electrones para compartir puede formar dos enlaces simples o un enlace doble. De este último caso tenemos una molécula muy importante y de la que seguramente hemos oído hablar mucho en torno del calentamiento global por ser responsable de incrementar el efecto invernadero de la atmósfera. Se trata del dióxido de carbono, su nombre indica que por cada átomo de carbono hay dos de oxígeno. Cabe recordar que, como el carbono está formando de dos dobles enlaces, no es considerado como un carbono carbonílico. Bien, esta es la representación de Lewis del dióxido de carbono:



Por otra parte, el grupo carbonilo es uno de los grupos funcionales más importantes de la química orgánica y ofrece una variabilidad de propiedades química de acuerdo a cuáles átomos estén unidos al carbono. Para cada combinación se hablará de un grupo funcional nuevo.

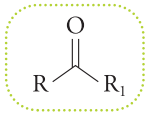
Estas son las variantes más usuales del grupo carbonilo (dado que ya hemos visto todas las formas en que se puede combinar el átomo de carbono, representaremos todos lo grupos funcionales en esquemas de líneas). Se suele utilizar la letra R para representar cualquier grupo de átomos que se una por un carbono al átomo al que está unida esta letra. Obviamos escribir el símbolo del carbono a fin de resaltar los distintos elementos que pueden unirse a éste.

Grupo funcional aldehído, consta de un enlace a carbono y otro a hidrógeno.

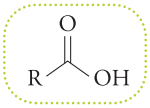


Grupo funcional cetona, consta de dos enlaces a carbono.

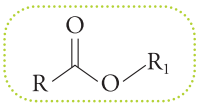
Grupo funcional ácido carboxílico, un enlace a carbono y otro a oxígeno,



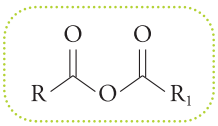
unido éste a un hidrógeno.



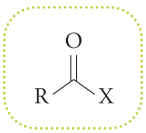
Grupo funcional éster, un enlace a carbono y otro a oxígeno, unido este último a otro carbono.



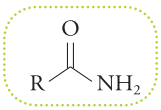
Grupo funcional anhídrido, un enlace a carbono y otro a oxígeno, unido este último a otro carbono carbonílico.



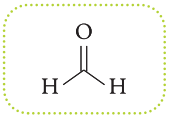
Grupo funcional halogenuro de acilo (o también halogenuro de ácido), un enlace a carbono y otro a un átomo del grupo 17, que se los llama también halógenos (que en griego significa "que genera sal"), se los señala genéricamente con una X.



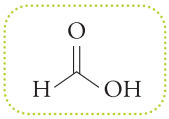
Grupo funcional amida, un enlace a carbono y otro a nitrógeno, puede o no estar unido a carbonos.



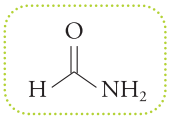
Hay moléculas que constan del grupo carbonilo, pero ninguno de los dos átomos unidos al carbono carbonílico es un carbono.
Por ejemplo: Formaldehído.



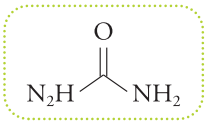
El ácido fórmico:



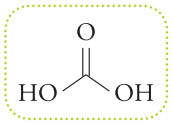
La formamida:



La urea:



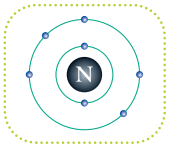
El ácido carbónico:



Todos estos grupos funcionales pueden ser interpretados por el sistema de Lewis.

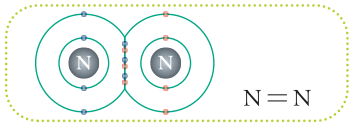
Unión del carbono con el nitrógeno

El nitrógeno pertenece al grupo 15 y es el séptimo elemento (Z=7), por lo tanto, su configuración electrónica en nuestra representación del sistema de Lewis es:



Antes de pasar a entender la unión del carbono con el nitrógeno, mencionaremos que el nitrógeno se puede combinar consigo mismo para formar

el nitrógeno molecular compartiendo tres electrones de la capa externa y formando un enlace triple:



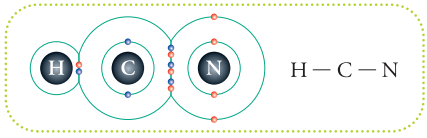
Este constituye el 78 % de la atmósfera y, por lo tanto, del aire que respiramos.

Dado que el nitrógeno puede formar hasta tres enlaces simples y el carbono hasta cuatro enlaces simples, existen tres casos posibles de unión entre el carbono y el nitrógeno.

Enlace triple

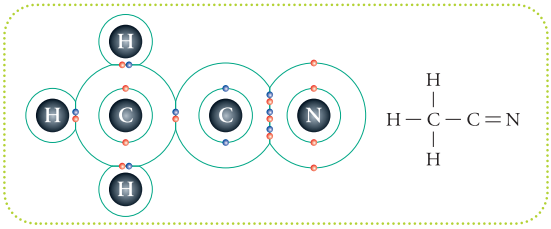
Un átomo de carbono unido a un átomo de nitrógeno por un enlace triple constituye el grupo funcional nitrilo.

La molécula más sencilla que podemos armar con un grupo nitrilo es uniendo un hidrógeno al carbono, se trata del cianuro de hidrógeno, una sustancia sumamente peligrosa:



Este grupo funcional está presente en numerosas moléculas orgánicas de importancia industrial, por ejemplo, está presente en el material polimérico con el que se confecciona la goma de nitrilo, o nitrilo a secas, utilizada para fabricar desde aros para sellos de juntas (O-rings) hasta guantes descartables.

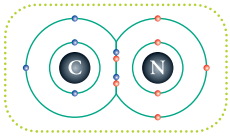
Otra sustancia importante que contiene este grupo funcional es el acetonitrilo:



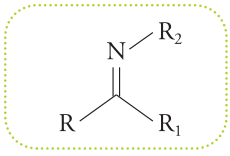
Se trata de un solvente menos polar[8] que el agua y miscible, es decir que se puede mezclar con ésta en toda proporción. Es muy utilizado en la técnica de cromatografía para separar moléculas con distintos grados de hidrofobicidad, es decir con distintos grados de afinidad por el agua, a mayor afinidad por el agua, menor hidrofobicidad y viceversa.

Enlace doble

La siguiente posibilidad de combinarse el carbono con el nitrógeno es compartiendo dos electrones cada átomo. El grupo funcional resultante es llamado imina.



Podemos observar que el carbono puede formar dos enlaces al compartir los dos electrones que le quedan libres en la capa externa. Por su parte, el nitrógeno puede establecer un enlace al compartir un electrón con un átomo vecino.



Simple enlace

La última forma en la cual el nitrógeno se pude combinar con el carbono es a través de un

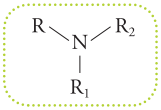
[8] La polaridad es una propiedad de las moléculas que se relaciona con la distribución de cargas que presenta. A mayor asimetría en la distribución de cargas mayor polaridad, y viceversa. Como consecuencia se entiende que moléculas estructuralmente distintas sean afines si tienen el mismo grado de polaridad.

enlace simple. Este grupo funcional se llama amina. Como el nitrógeno tiene otros dos electrones para compartir hay tres tipos de aminas.

Las aminas primarias: los 2 electrones están compartidos por hidrógenos.

Las aminas secundarias: uno de los 2 electrones está compartido con otro carbono.

Las aminas terciarias: los 2 electrones están compartidos con carbonos.



Tipos de enlaces

Hasta ahora hemos visto unos cuantos ejemplos de enlaces entre carbono y distintos elementos. Nos hemos hecho una idea de las formas de combinar los átomos para formar moléculas. Si bien no vamos a ver enlaces de otros tipos vale aclarar que todos los enlaces que presentamos son de carácter *covalente*.

¿Qué quiere decir esto?

Bien, si observamos con detenimiento la regla del octeto, inclusive considerando la excepción del hidrógeno, implica que los átomos lleguen a la configuración del grupo 18, o sea de los gases nobles cuya reactividad es nula[9] comparada con el resto de los elementos. Recordemos que los *gases nobles* tienen en su capa externa de electrones 8 electrones, excepto el helio que tiene 2.

Como regla, más o menos general, podemos decir que, aquellos elementos que están muy cerca de alcanzar la configuración electrónica de un gas noble cediendo un electrón, son pobremente electronegativos, por el contrario aquellos que al aceptar un electrón acceden a la configuración electrónica de un gas noble son elementos altamente electronegativos. El elemento más electronegativo es el flúor (F), por el contrario, el menos electronegativo es el francio (Fr). Esta propiedad (la electronegatividad) fue cuantificada por diversos métodos y con diversos criterios y se estableció una clasificación de las uniones químicas según sea el valor de la diferencia de electronegatividades entre los átomos involucrados en la unión.

Como guía general, podemos decir que las uniones conocidas como uniones iónicas se producen cuando las electronegatividades de los átomos son muy diferentes, una muy alta y la otra muy baja, por ejemplo para la sal de mesa, el cloruro de sodio (NaCl), la diferencia entre las electronegatividades es tan marcada que produce que los átomos se encuentren cargados[10] (el sodio positivo -Na^{1+}- y el cloro negativo -Cl^{1-}-) y no se puede hablar, estrictamente, de una molécula ya que estos pares se disponen en el espacio formando redes tridimensionales que alternan una carga positiva con otra negativa. En la **figura 22** las esferas violetas representan los iones sodio y las verdes los iones cloro.

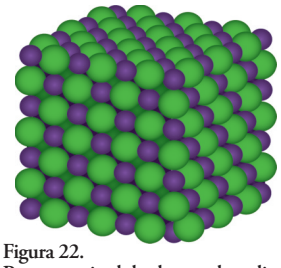


Figura 22.
Parte un cristal de cloruro de sodio.

Para el caso de electronegatividades similares y bajas, tenemos lo que se llama la unión

[9] Se han hecho reaccionar a los gases xenón (se ha obtenido el tetrafluoruro de xenón –XeF_4–), el kriptón (se ha obtenido el tetrafluoruro de kriptón –KrF_4–) y radón (se logrado preparar el difluoruro de radón –RnF_2-), pero en todos los casos bajo condiciones extremas.

[10] Cuando un átomo se encuentra cargado, por exceso o defecto de electrones, se lo llama ion. Si el ion tiene carga positiva se lo suele llamar catión, si tiene carga negativa se lo suele llamar anión. Se puede indicar esta situación al agregar al símbolo del elemento un superíndice con la magnitud de la carga y su signo, por ejemplo, Mg^{2+}.

metálica, por ejemplo en el caso del zinc (Zn, Z = 30, grupo 12, período 4) o el oro (Au, Z = 79, grupo 11, período 6). Los átomos se encuentran unidos también en redes cristalinas llamadas granos, formando fuertes enlaces entre sí y conformando una masa única, lo que explica sus propiedades de conductividad (fácil movimiento de electrones) y ductilidad (deformación sin fractura).

Finalmente, tenemos el caso de electronegatividades altas y similares. Se trata de todos los casos que presentamos y presentaremos. Los electrones no son atraídos por ningún núcleo con mayor fuerza que su núcleo vecino y son, por lo tanto, compartidos en la región intermedia entre ellos.

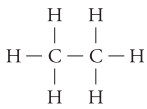
Antes de Lewis

Antes de que Gilbert N. Lewis publicara su método la atomicidad era lo único que se conocía de algunas moléculas.

¿A qué llamamos atomicidad?

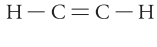
La atomicidad es la cantidad de átomos de un determinado elemento presente en una molécula. Este dato se lo puede escribir de la siguiente manera: se escribe el símbolo del elemento y se le agrega un subíndice (que es un número entero, mayor o igual a 2) que representa la cantidad de átomos de ese elemento que están presentes en la molécula considerada. Si no tiene subíndice se entiende que la atomicidad de ese elemento es 1. El resultado de describir de esta manera a la molécula se la llama fórmula molecular del compuesto que se trate.

La fórmula molecular del etano: $\mathbf{C_2H_6}$ corresponde a esta estructura:



La fórmula molecular del eteno: $\mathbf{C_2H_4}$ corresponde a:

La fórmula molecular del etino: $\mathbf{C_2H_2}$ corresponde a:

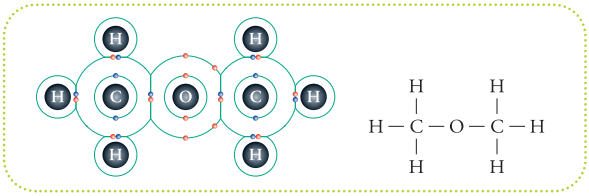


Podemos observar que no podemos obtener la topología, es decir, la forma en que se conectan los átomos a partir de la fórmula molecular.

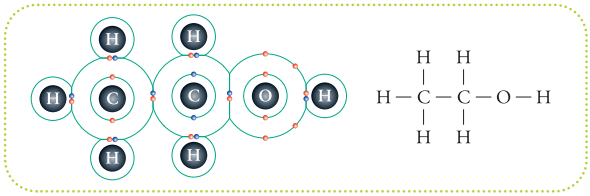
Gracias al trabajo de Gilbert N. Lewis sí podemos hacerlo para todas las moléculas orgánicas que admiten una única posibilidad de combinación y, para las que admiten más de una combinación, podemos decir exactamente cuáles son.

Por ejemplo, si tenemos la siguiente fórmula molecular: C_2OH_6, dos átomos de carbono, uno de oxígeno y seis de hidrógeno, existen sólo dos formas de combinar estos átomos:

1) Dimetil éter cuyo grupo funcional distintivo, y único, es el éter:



2) Etanol o alcohol etílico cuyo grupo funcional distintivo, y único, es el alcohol.



La forma de distinguir estos casos por sus características macroscópicas, es decir, por aquellas propiedades que podemos medir utilizando una porción apreciable de materia. En este caso el dimetiléter es un gas a temperatura ambiente y el etanol es líquido, este hecho los hace claramente distinguibles.

Durante una investigación real, la situación suele darse en sentido inverso. Dos sustancias muy distintas del punto de vista de sus propiedades químicas resultan con una fórmula molecular idéntica. Y también se da el caso en que sustancias muy similares de acuerdo a un grupo de propiedades resultan muy diferentes en sus fórmulas moleculares.

Ambos casos suelen encontrar explicación cuando se dilucida en detalle las estructuras moleculares.

Un segundo ejemplo, es el caso de la siguiente fórmula molecular: C_3OH_6. Presenta cuatro formas de conectar estos átomos en forma lineal y una en forma cíclica. Nombraremos las moléculas, las lineales son:

1) propanal o propionaldehído,
2) propanona o acetona,
3) 1 - propenol,
4) 2 - propenol,

y la cíclica:

5) epoxipropano.[11]

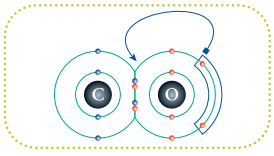
Debemos explicar una última excepción a la regla del octeto, se trata del enlace dativo.

Enlace covalente dativo

Los enlaces covalentes dativos o de coordinación se los utiliza para explicar enlaces entre átomos que ya completaron su octeto.

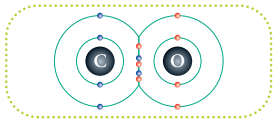
Por ejemplo, en caso del monóxido de carbono (CO), molécula tristemente conocida por causar la muerte por asfixia al unirse a la hemoglobina con mayor afinidad que el oxígeno.

Con lo que presentamos hasta ahora no podríamos explicar la existencia de esta molécula si no fuera por que el oxígeno comparte un par de electrones que habríamos señalado como no compartido.



[11] Explicaremos más adelante el uso de un programa de computación, especialmente, diseñado para dibujar modelos moleculares, con él dibujaremos estas moléculas.

El resultado es que el monóxido de carbono resulta de un triple enlace entre el carbono y el oxígeno y cada átomo conserva un par de electrones no compartidos.

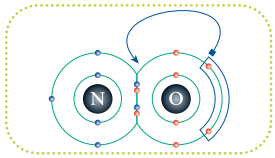


Como esta situación es excepcional, el enlace dativo puede representarse con una flecha que apunta al aceptor del par electrónico, en este caso el carbono: C ⇇ O

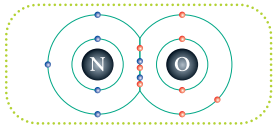
Otro caso similar al de un enlace dativo, es el que permite explicar la existencia del óxido nítrico (NO). Esta es una molécula sumamente importante en fisiología ya que cumple el rol de regulador de la vasodilatación, pero también en la actividad neuronal e inmunológica.

Lo curioso para una molécula con un rol fisiológico, tan importante, es que se trate de un gas.

Se entiende la unión entre un átomo de oxígeno y uno de nitrógeno de la siguiente manera: si el oxígeno compartiera un par de electrones no compartidos, como en el caso del monóxido de carbono, el nitrógeno tendría su octeto completo con un electrón en exceso.



Por lo tanto, hay un solo electrón compartido:

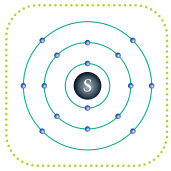


Esta situación exige una nueva representación, si una línea llena representa un par de electrones compartidos, una línea de guiones representa un único electrón compartido: N ⩶ O

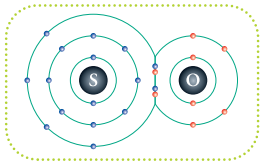
¿De qué otro elemento esperaríamos que tenga un comportamiento similar, es decir, que forme enlaces covalentes dativos?

Recordemos el criterio que perduró en la clasificación de los elementos, el que D. Mendeleev propuso en su primera tabla periódica de elementos en 1869: fue el de agrupar los elementos por propiedades químicas, así que es de esperar que, de modo similar al oxígeno, deberían comportarse los elementos del grupo al cual pertenece. Así sucede con el azufre, muchos de los compuestos que forma se explican por formación de enlaces covalentes dativos.

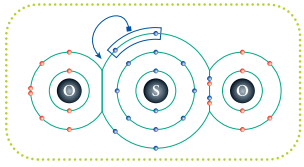
Para comprender la estructura electrónica del azufre hay que recordar que es el decimosexto elemento (Z = 16), por lo tanto, su núcleo tiene 16 protones que compensan sus cargas con 16 electrones. Estos se ubican con la siguiente distribución: 2 y 8 en capas internas y 6 en la capa más externa.



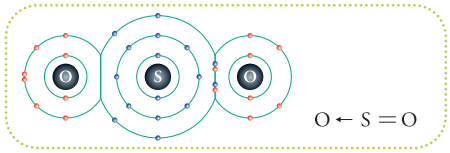
Por ejemplo, el compuesto monóxido de azufre (SO) es perfectamente explicable sólo con enlaces covalentes, un enlace doble con el oxígeno.



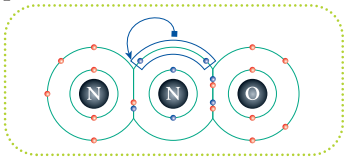
Pero para explicar el compuesto dióxido de azufre (SO_2) debemos considerar un enlace covalente dativo:



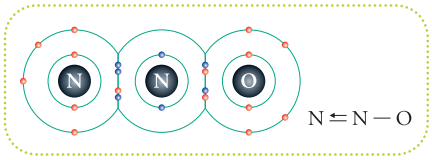
Por lo tanto, el átomo de azufre establece un enlace dativo con el átomo de la izquierda y un enlace covalente doble con el de la derecha y queda con un par de electrones no compartidos.



Finalmente, consideraremos casos en los cuales el nitrógeno comparte su par de electrones desapareado. Por ejemplo, en el caso del óxido nitroso (N_2O), esta molécula que bien podría dibujarse como cíclica, es en realidad lineal. El nitrógeno establece un doble enlace con el oxígeno y un enlace simple con el otro nitrógeno. El octeto se completa con un enlace covalente dativo.



Finalmente, quedan los octetos completos de la siguiente forma:



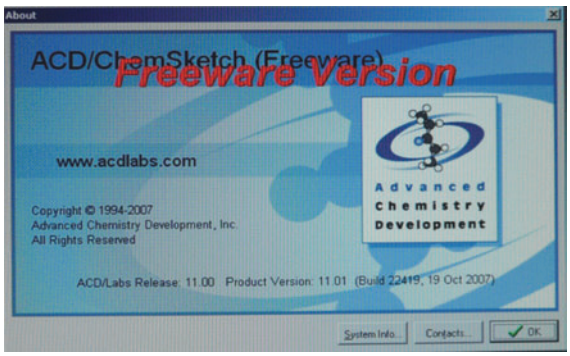
Hay que notar que el sistema de Lewis nos permite predecir estructuras en las que no hay enlaces covalentes dativos, éste último nos sirve para explicar datos experimentales que no concuerdan con el sistema de Lewis.

Herramientas de dibujo

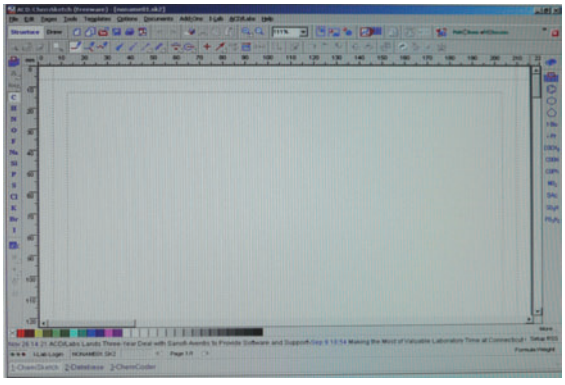
Como podemos observar, cuantos más átomos tiene nuestra fórmula molecular, tanto mayor será el número de estructuras que la satisfacen.

Para agilizar el trabajo presentaremos algunas funciones de un programa de computación, disponible en forma gratuita, diseñado especialmente para ayudar en la tarea de dibujar fórmulas.

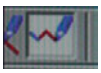
Se trata del programa de generación de modelos moleculares de acceso gratuito ACD/ChemSketch (Freeware)[12].



Invitamos al lector a instalarlo en una computadora para poder practicar su uso y sacarle el mejor provecho a la hora de resolver los ejercicios del final del capítulo. Una vez instalado, lo ejecutaremos y ésta es la pantalla de inicio, lo primero que vemos es una hoja con el menú de herramientas.

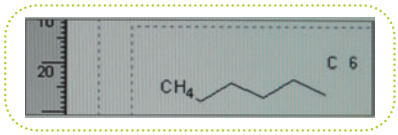


Pulsamos el botón izquierdo del ratón sobre este botón:

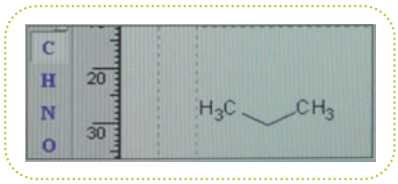


[12] Disponible en http://www.acdlabs.com/download/

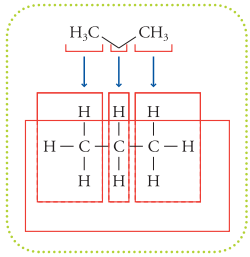
Nos permitirá dibujar una cadena carbonada, del largo que deseemos, moviendo el ratón y manteniendo el botón izquierdo apretado (esto se llama arrastrar el puntero):



Por ejemplo, en este caso nos indica que la cadena que dibujará si soltamos el botón será de 6 carbonos. Nosotros necesitamos una cadena de 3 carbonos ya que dibujaremos el propanal o propionaldehído cuya atomicidad para el carbono es 3, retrocedemos el puntero y soltamos el botón para dibujar:



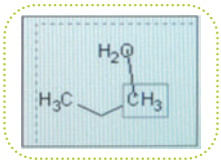
Este es el primer resultado parcial de nuestro dibujo. La molécula representada es el propano. Debemos notar que el dibujo tiene menos símbolos que los que hemos hecho hasta ahora. Así debe entenderse: cada vértice representa el grupo metileno, constituido por un carbono unido a dos hidrógenos (-CH_2-). Esta representación se suele llamar representación de esqueleto, ya que se dibuja lo mínimo necesario para señalar las partes carbonadas de la molécula, esto es usando un punto y dos líneas. En los extremos, se señalan a los hidrógenos con un solo símbolo del elemento y un subíndice que señala, justamente, su atomicidad. Esta es la equivalencia entre las representaciones detalladas que veníamos haciendo y el resultado obtenido:



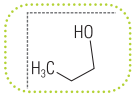
A continuación, pulsamos el botón que nos permitirá agregar un oxígeno a nuestro dibujo, se encuentra en el marco izquierdo de la pantalla:

Luego apretamos el botón de enlace simple para que dibuje sólo un oxígeno y no una cadena:

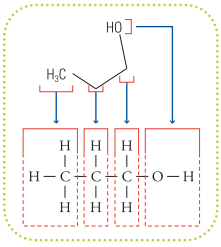
Apretamos el botón izquierdo donde queremos ubicar el oxígeno. Automáticamente, se dibuja una molécula de agua, pero, sin soltar el botón, arrastramos el puntero hacia el carbono que deseamos unir al oxígeno:

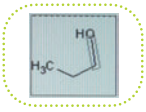


Y lo soltamos. Este es el resultado:

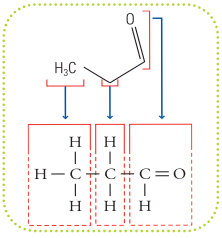


El resultado, aún parcial, de nuestro dibujo es el propanol que lo interpretamos de la siguiente manera:

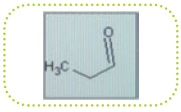




Finalmente, nos ubicamos con el puntero sobre le enlace entre el carbono y el oxígeno y apretamos el botón izquierdo, el enlace pasará de simple a doble y el hidrógeno del grupo alcohol será suprimido.

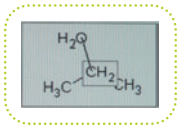


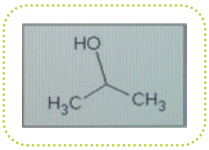
Este es nuestro resultado buscado, el propanal (C_3OH_6):



Esta es la interpretación en términos de la fórmula estructural.

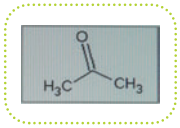
Ahora dibujemos la siguiente molécula, la propanona o acetona.
Repetiremos el procedimiento, pero uniremos el oxígeno al carbono central:





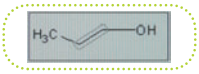
El resultado es el isobutanol o alcohol isopropílico.

Nuevamente, convertimos el enlace carbono-oxígeno en doble, pulsando una vez, sobre él. Tenemos la acetona (C_3OH_6):

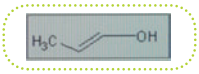


Ahora dibujaremos el 1-propenol. Tenemos dos formas de dibujarlo:

1) la primera forma es repetir el procedimiento que hicimos para el propanal, pero ubicar el doble enlace (pulsando una vez sobre el enlace simple) entre el carbono del grupo alcohol y el siguiente, así:



Este es el resultado:



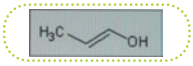
2) la segunda forma es hacer una cadena de cuatro carbonos y transformar el último en un oxígeno y luego ubicar el doble enlace como lo hicimos antes.
Primero dibujamos:

Esta molécula se llama butano.
Luego apretamos los botones: y

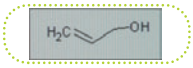
Ubicamos el oxígeno en un extremo:

Apretamos el botón izquierdo del ratón:

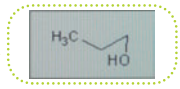
Y, finalmente, como antes, ubicamos el doble enlace para obtener el 1-propenol (C_3OH_6):



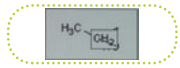
Para dibujar el 2-propenol, podemos utilizar cualquiera de los caminos anteriores, la única diferencia es que, la ubicación del doble enlace, en este caso, será entre el carbono del medio y el último:

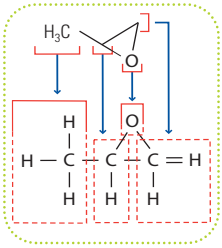


Finalmente, dibujamos el epoxipropano; comenzamos por dibujar la cadena de tres carbonos y luego agregamos el oxígeno en la posición media entre dos carbonos, donde deseamos que aparezca el vértice de un ciclo de tres miembros, así:

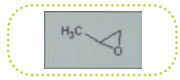


Luego arrastramos el puntero desde el oxígeno hasta el carbono central:





Al soltar le botón del ratón obtenemos nuestra molécula, el epoxipropano (C_3OH_6):



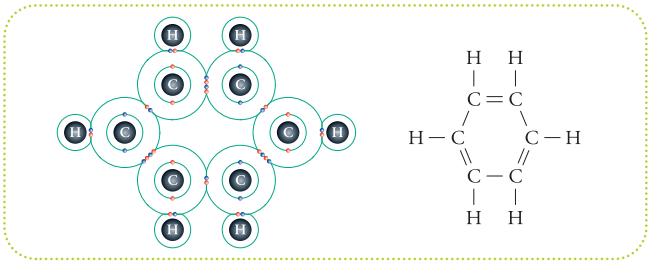
Entendemos esta molécula de la siguiente manera.

Con lo que hemos aprendido, al dibujar todas las estructuras posibles que tienen la fórmula molecular C_3OH_6 podemos dibujar, fácilmente, otras familias de moléculas que compartan la misma fórmula mínima.

Antes de continuar quisiera que notáramos que esta última molécula forma un ciclo de tres miembros. Los arreglos cíclicos son muy importantes ya que se encuentran presentes en muchísimas moléculas de interés biológico como ser, por mencionar sólo un grupo de ellas, los *nucleótidos* que forman la macromolécula de ADN.

Uno de los arreglos cíclicos más famosos y, muy probablemente, el primero en ser propuesto, fue el de la *molécula de benceno*.

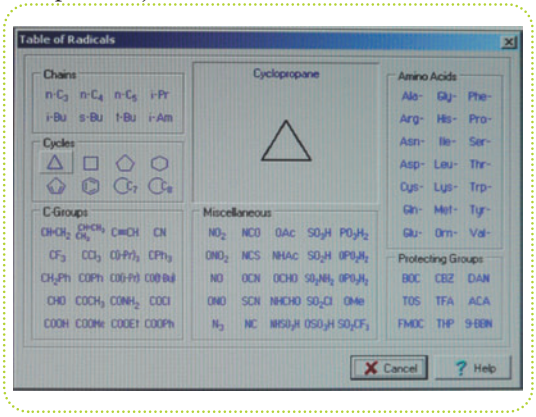
Esta molécula tiene su fórmula molecular C_6H_6, la única forma de ubicarlos de forma tal que todos los átomos de carbono estén completando su octeto es alternando enlaces dobles con simples y uniendo el último con el primero. El químico alemán *August Kekulé* fue quien propuso la estructura cíclica del benceno en el año 1865, desde luego, no lo hizo en los términos químicos que nosotros manejamos en la actualidad. El sistema de Lewis de 1916 debería poder explicar los datos experimentales del benceno y lo hace:



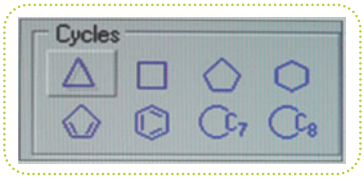
En el programa ACD/ChemSketch (Freeware) tiene una base de datos de plantillas de estructuras utilizadas frecuentemente, podemos ver todas las plantillas apretando el botón.

Se abrirá la siguiente ventana que lleva por título en inglés Table of Radicals que quiere decir, simplemente, tabla de radicales. Se llama radical a toda porción de una estructura, no importa cuán compleja sea esta porción.

En esta tabla se agrupan los radicales, más frecuentemente usados, que el programa tiene predibujados:



Ahora nos interesa comprender las representaciones de los ciclos (en inglés "cycles"). Observemos este grupo:



Los primeros cuatro símbolos representan ciclos saturados, es decir, con la cantidad máxima de hidrógenos que puede unir cada carbono, en el caso de ciclos, como cada carbono está unido a otros dos por un enlace simple, sólo puede compartir 2 electrones y como el hidrógeno sólo necesita 1 para completar su capa externa (recordemos que los elementos del grupo 1 completan su capa externa con 2 electrones en vez de 8) la única forma de que el carbono complete su octeto es uniendo 2 hidrógenos.

Los mencionamos de izquierda a derecha: ciclopropano, ciclobutano, ciclopentano y cichohexano.

Los dos primeros ciclos de la segunda fila:

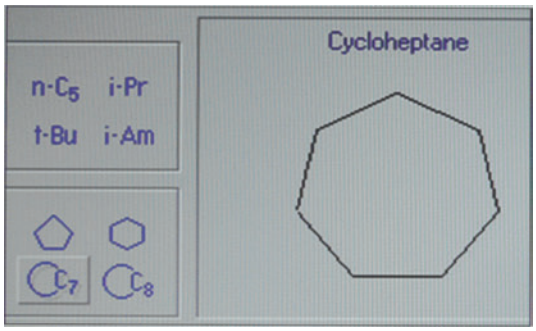
Son ciclos insaturados, ya que cada carbono tiene una cantidad menor de hidrógenos que la cantidad máxima de hidrógenos que podría unir, sin tener que desvincular ningún carbono. En el caso del ciclo de cinco miembros, el ciclopentadieno, sólo un carbono se encuentra uniendo dos hidrógenos, los otros cuatro carbonos están unidos a un hidrógeno.

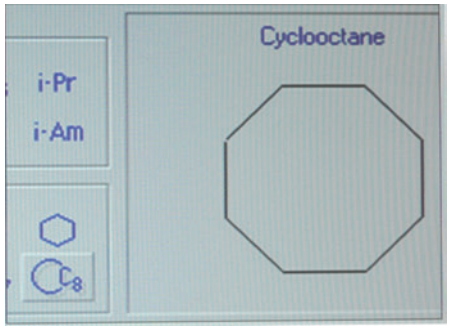
El ciclo de seis miembros es el benceno que ya hemos dibujado e interpretado en el sistema de Lewis.

Los otros dos ciclos son de 7 y 8 miembros, pero no sabemos si tienen o no instauraciones (dobles enlaces entre carbonos).

Para observar la estructura tenemos una ventana que nos muestra, automáticamente, el dibujo que corresponde a cada botón.

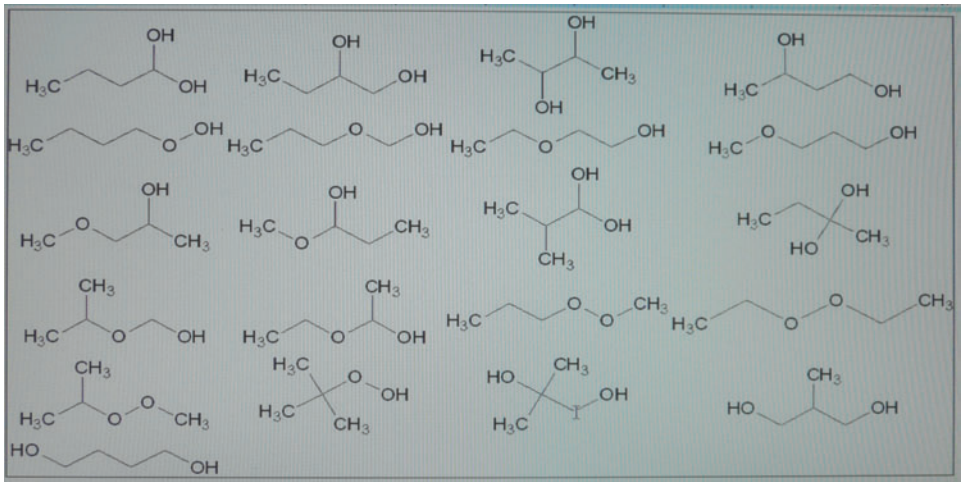
En la parte superior de la ventana, figura el nombre del radical, se trata de dos moléculas saturadas, el cicloheptano y el ciclooctano.





Tener en cuenta los arreglos cíclicos nos ayudará a resolver, en muchos casos, la estructura molecular a partir de su fórmula.

Por último, veamos cómo podemos ilustrar la variabilidad de estructuras que ofrece la fórmula molecular $C_4O_2H_{10}$:



Ya tenemos los conceptos y las herramientas para resolver los ejercicios.

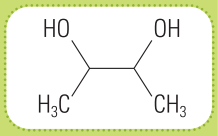
Actividad

1) Esquematizar en el sistema de Lewis los siguientes elementos: helio (He, Z=2), berilio (Be, Z=4), boro (B, Z=5), fluor (F, Z=9), cloro (Cl, Z=17). Señale los electrones que no participan en los enlaces químicos.

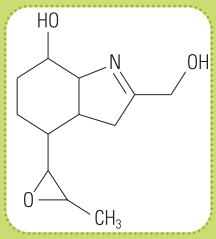
2) Esquematice siguiendo el sistema de Lewis las siguientes moléculas, considerando utilizar enlaces covalentes dativos si fuera necesario: agua (H_2O), amoníaco (NH_3), ácido nítrico (HNO_3), ácido carbónico (H_2CO_3).

3) Presentar 12 estructuras moleculares que puedan tener la fórmula molecular C_3H_7NO de las cuales, por lo menos, 3 sean estructuras cíclicas de cuatro miembros y haya 2 de tres miembros.

4) Modifique la siguiente estructura quitando o agregando hidrógenos y enlaces, tal que haya dos carbonos con dos enlaces simples y uno doble, dos carbonos con cuatro enlaces simples.



5) Corte enlaces y agregue hidrógenos en la siguiente molécula ($C_{12}H_{19}NO_3$) tal que el resultado sea: 3 moléculas cuyas fórmulas moleculares sean C_3H_8O, C_4H_8O y C_5H_9NO.



6) Dibuje e informe la fórmula molecular de las siguientes moléculas descriptas, sólo por la relación entre sus carbonos, complete con los hidrógenos que sean necesarios:
   - Molécula 1: un carbono central unido a la máxima cantidad de carbonos que se pueden unir directamente.
   - Molécula 2: un núcleo de benceno unido por un enlace simple a otro núcleo de benceno.
   - Molécula 3: un núcleo formado por dos bencenos que comparten un enlace, con 4 metilos unidos (un carbono unido a tres hidrógenos).
   - Molécula 4: un ciclo de siete miembros a cual se le une una cadena de tres carbonos de forma tal que en el punto de unión esta cadena está ramificada; no contiene dobles enlaces.
   - Molécula 5: a la molécula 1 se une una segunda "capa" de carbonos.
   - Molécula 6: a la molécula 2 se une un tercer núcleo de benceno de forma tal que quedan formadas 4 moléculas de benceno vecinas.

7) Presente 12 estructuras que cumplan la siguiente fórmula molecular: $C_{10}H_{12}O$ y que siempre tengan 6 carbonos formando un núcleo bencénico.

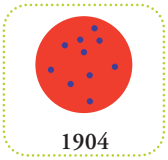
El ladrillo modelo siglo XX o el modelo atómico contemporáneo

El modelo atómico contemporáneo es bastante más complejo que el propuesto a comienzos de siglo XX por Gilbert Lewis. Para hacernos una idea de lo complejo que ha resultado la constitución de un modelo atómico que dé cuenta de todas las observaciones experimentales, mencionaremos, brevemente, algunos hechos claves en esta historia.

Si bien el concepto de átomo es sumamente antiguo, se lo puede rastrear hasta la antigua Grecia, en las obras de Demócrito y Leucipo de siglo V a.C. El inicio de los intentos de describir fenómenos cuantitativos basados en la hipótesis de que la materia está constituida por piezas indivisibles está marcado por los trabajos de John Dalton de 1801. El primer modelo de átomo fue, simplemente, una esfera. Por cada elemento, había un tipo de esfera. Algunas de ellas se podían combinar en proporciones definidas por números enteros y formar moléculas.

Experimentos con electricidad y gases a baja presión (enrarecidos, como se les llamaba), sugirieron que había partículas cargadas que portaban carga eléctrica negativa. También fueron muy difundidos los experimentos con soluciones en vez de gases que probaron que había también partículas con carga positiva.

Los resultados de estos experimentos fueron sintetizados por *John J. Thomson* en su modelo del átomo, conocido como modelo de budín con pasas. Estas últimas eran las partículas cargadas negativamente, los electrones –término acuñado por él– y el resto, la masa, estaba cargada positivamente de forma tal, de compensar la carga electrónica.



Este modelo, claramente formulado, pudo ser puesto a prueba. El recordado experimento de *Ernest Rutherford* consistió, fundamentalmente, en el estudio estadístico de la dispersión de partículas alfa[13] debido a la interposición de una lámina delgada de oro.

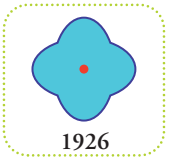
La conclusión más sorprendente fue que la mayor parte del volumen del átomo estaba vacía. La masa se concentraba en una diminuta región central cargada positivamente, a la que se llamó núcleo y los electrones se encontraban en movimiento alrededor de éste. A partir de estos experimentos es que comenzó a hablarse de que el átomo sería como un sistema solar en miniatura, donde un cuerpo masivo central gobierna el movimiento de aquellos que lo orbitan.

A la luz de mayor número de datos experimentales, el modelo de sistema solar fue refinándose lo suficiente como para dar cuenta del comportamiento del gas de hidrógeno. Este modelo incluyó a la *teoría de la relatividad* presentada por *Albert Einstein* en 1905. Se lo conoce, también, como modelo del átomo de hidrógeno de Niels Bohr.

[13] Estas partículas son producidas por algunas sustancias que presentan radiactividad. Las partículas alfa no son otra cosa que núcleos de helio, sin electrones, por lo tanto, tienen carga eléctrica positiva 2+.

Este modelo *mecánico corpuscular* o modelo clásico, mostró grandes éxitos pero sucesivos fracasos para explicar determinados fenómenos; resultaron escollos insalvables y fue necesario plantear radicales cambios en la formulación del modelo atómico y de concebir un límite objetivo a la determinación de la posición y la velocidad de una partícula[14].

El modelo que actualmente manejamos (o intentamos manejar), es fruto de una rama de la física llamada *mecánica cuántica*. Describe, no la posición de un electrón en torno de su núcleo, sí una región del espacio en la cual el electrón se encuentra con una determinada probabilidad definida por el investigador. A estas regiones del espacio se las llama orbitales. Típicamente, un orbital se define como la región del espacio donde es posible hallar a un electrón en movimiento con una probabilidad del 90% al 99%. Nótese que hay un margen (del 10% al 1%) de incertidumbre sobre su posición.


1926

Gracias a esta teoría en las tablas periódicas de mediados del siglo XX en adelante, se puede entender el ordenamiento de los elementos, no sólo, por su número atómico (Z), es decir, la cantidad de protones que tiene su núcleo sino, también, comprender cómo se van ordenando, en número creciente, los electrones que tiene cada elemento a medida que aumenta Z.

El camino de la investigación de la estructura del núcleo se ha desarrollado en paralelo a la investigación de la región electrónica. Ha dado como fruto el conocimiento de que hay partículas, aún más elementales, que constituyen los núcleos. Pero aún siendo los protones y los neutrones partículas muy pequeñas, éstas están constituidas por partículas aún más pequeñas. Cuanto mayor detalle se desea tener del conocimiento del núcleo, tanto mayor es la energía necesaria para llevar a cabo los experimentos o sea la ruptura de partículas en otras más pequeñas. Y tanto lo es, que son necesarios consorcios internacionales para coordinar los esfuerzos monetarios para construir las máquinas que sean capaces de golpear los núcleos, de tal forma, que les hagan mostrar lo que tienen dentro.

Un método bastante conocido por los chicos chiquitos, aplicado infinidad de veces en juguetes que tienen, por ejemplo, una fuente de sonido oculta en su interior.

Un excelente relato de estos desarrollos científicos fue hecho por Max Born en su libro El Universo Inquieto[15].

[14] Esto se conoce como principio de incertidumbre y establece un límite a la precisión con que puede hacerse una determinación de la velocidad y la posición de un objeto en simultáneo.
[15] Max Born, EUDEBA, 1974.