

# QUIMICA ORGANICA

Por ANDRES LEON MAROTO  
Catedrático

## PROLOGO

*El progreso de la Química en estos últimos años, conseguida primero por la teoría electrónica y luego por la Mecánica cuántica, han hecho se creen teorías que explican el mecanismo de casi todas las reacciones, agrupándolas por su semejanza y que por consiguiente ya no sea necesario el estudio sistemático de los distintos elementos químicos ni el esfuerzo memorístico que era necesario en Química Orgánica para aprender métodos distintos de obtención de las diferentes funciones, ni el de las propiedades de cada compuesto. Hoy, además, es de gran interés el enseñar desde los primeros contactos con la Química, la estructura atómica de los cuerpos y los dibujos representativos de los orbitales atómicos, pues ambas cosas le servirán de ayuda al estudiante para deducir reacciones y propiedades no estudiadas por él.*

*Habiendo dedicado casi toda mi vida científica a la Química Orgánica, en cuyo campo hice casi todas mis investigaciones y trabajos técnicos industriales (1), he considerado podía hacer un ensayo de exposición clara y moderna de la Química Orgánica que se exige en el Curso Preuniversitario, y a esto responde la publicación de estas notas en la "Revista de Enseñanza Media".*

---

(1) En 1934 publiqué, con el Profesor sueco Holger Erdtman, en la revista de la Real Sociedad Española de Física y Química, un trabajo sobre "Influencia de los grupos R-COO- y -R en la reactividad cationoide de los grupos de Quinonas.

En 1935 publiqué, en la Revista de la Real Academia de Ciencias, un trabajo titulado "Ensayo de una exposición elemental de la teoría electrónica del Profesor Robinson aplicada a reacciones orgánicas".

Cuando trabajaba con el Profesor R. Robinson (1930-1931), llevaba ya este Profesor algunos años aplicando la teoría electrónica para explicar las reacciones orgánicas. Todos los que trabajábamos en aquella época con él (ingleses, suecos, indios, japoneses, suizos y yo), nos interesamos por sus nuevas teorías y discutíamos con frecuencia las explicaciones, que por la misma, se podían dar de algunas de las reacciones que utilizábamos en nuestros trabajos de investigación. Un día en que más interesados estábamos en esas discusiones, entró el Profesor Robinson y encontrándonos en tan viva discusión nos preguntó qué nos sucedía. Se le explicó la causa y nos dijo: "Está bien el querer explicar las reacciones orgánicas por la teoría electrónica, pero no olviden ustedes nunca que para hacer Química Orgánica es preciso determinar muchos puntos de fusión." La frase no podía ser más significativa. El Profesor A. R. Todd (de la Universidad de Cambridge), discípulo de Robinson y hoy también premio Nobel, dice en el prólogo de la obra del Profesor Peter Stykes, "Mecanismos de Reacciones en Química Orgánica": Las bases teóricas son vitales para un entendimiento de la Química Orgánica, pero no hay que olvidar que sigue siendo esencialmente una Química Experimental."

Hay otro punto que creo importante y del cual quiero dar mi opinión. Es el poco interés y casi desprecio que ciertos innovadores de la exposición moderna de la Química tienen para la Orgánica, a la que muchos libros de Química General, dedican muy poco espacio. ¿Es que en la Química Orgánica las propiedades de los cuerpos no responden con la claridad que en la Inorgánica a su constitución? ¿Es que la Química Orgánica para los estudiantes de Enseñanza Media tiene menos importancia que la Inorgánica? ¿Están los médicos y los biólogos conformes con esta idea? Creo que no. Además, para formar personas cultas me parece más importante que tengan una idea de lo que es el petróleo y sus componentes, de que son los hidratos de carbono, los albuminoides, las materias plásticas, etc., etc., que el que haga un estudio detallado de los oxácidos del cloro, por ejemplo. Tuve ocasión en el Seminario organizado por el O. E. C. E., en Irlanda, en donde nos reunieron a Profesores de Química de Enseñanza Media de Europa, para que hiciésemos el programa que debería ser explicado en este grado de enseñanza, de exponer estos puntos de vista y gran número de ellos coincidían con mis ideas.

# LECCION 1

## ENLACES DEL CARBONO

ENLACES DEL CARBONO: LONGITUD Y ANGULOS DE LOS ENLACES; RADIOS COVALENTES.—REPRESENTACION DE LAS MOLECULAS ORGANICAS; MODELOS ATOMICOS.

### INTRODUCCION

#### FISICA CLASICA (1)

En la Física Clásica se representaban los átomos como sistemas planetarios de electrones que giraban alrededor del núcleo del elemento. Rutherford supuso al átomo como un sistema planetario, infinitamente pequeño, a cuyo alrededor, en órbitas circulares, giraban los electrones a grandes velocidades, justamente las necesarias para que la fuerza centrífuga de repulsión compensase la de atracción del núcleo, haciendo así posible la estabilidad del sistema, puesto que de otra manera el electrón, por la atracción que sufre del núcleo se precipitaría sobre él. El estudio de los *espectros atómicos* fue el que condujo a esta representación. Para obtener el espectro de un elemento habría que someter éste a una temperatura elevada, generalmente obtenida por la chispa eléctrica. La elevada temperatura de ésta, excitaba al átomo del elemento, emitiendo radiaciones que se analizaban con el *espectroscopio*. De esta manera resultaban espectros discontinuos o de rayas. Cada una de ellas representaba a una luz y el conjunto de éstas era característico del elemento que las emitía. Cada cuerpo daba, pues, un espectro propio distinto del de otro elemento. Esta emisión de luz por el átomo excitado por la descarga eléctrica, era debido a que sus electrones de las órbitas más internas, o sea, las más próximas al núcleo, tomaban energía y pasaban a órbitas superiores (de niveles energéticos mayores) desde los cuales volvían a sal-

(1) No siendo posible conocer la preparación que tienen los alumnos de las primeras lecciones de Química del Curso Preuniversitario, creo necesario, en esta introducción, ponerles al corriente de los conocimientos que necesitan para poder entrar en el programa oficial de Química Orgánica, hecho con vistas a la Química moderna. Aunque sea muy rápidamente (todo lo que permite el tema) explicaré los conceptos fundamentales necesarios de la Mecánica Clásica y de la Cuántica.

Todos aquéllos que tengan ya una idea de estos conceptos pueden prescindir de esta Introducción.

tar a su estado normal, emitiendo la energía que habían tomado en la excitación. Esta energía la emitían en forma de luces de distinta longitud de onda (líneas en el espectro). Ese salto a su estado normal lo hacían por saltos intermedios, emitiendo en cada uno de ellos una radiación diferente. La energía que se requería para hacer saltar a electrones próximos al núcleo, era mayor que para los más alejados, pues los más próximos estaban más fuertemente unidos a él. Cuando todos los electrones de un átomo están en sus órbitas normales, es decir en las de energía mas baja, se dice que el átomo está en su *estado fundamental*.

Los electrones giran en sus órbitas a grandes velocidades, pues de otra manera, según hemos dicho antes, serían atraídos por el núcleo, que tiene carga positiva. Para explicar este hecho, Rutherford emitió la idea de que los electrones estaban en movimiento circular alrededor del núcleo. Este modelo fue necesario corregirle porque con él no era posible explicar los espectros obtenidos con rayos X. Rutherford intentó explicarlos suponiendo que los electrones en su giro alrededor del núcleo podían emitir energía en forma de radiación, pero tal suposición era inadmisibile, puesto que de ser así, la estabilidad del sistema quedaría rota, pues la atracción del núcleo haría que el electrón a medida que perdiese energía, se precipitaría hacia él.

Bohr, tomando como modelo el de Rutherford, propuso una corrección con la que se pudiese explicar bien, la producción de los espectros. En líneas generales, su idea fue ésta. En lugar de la órbita única de Rutherford admitió la existencia de varias. El electrón tendría una energía que sería suma de la creada por su movimiento de giro (*energía cinética*) más la *potencial* por su posición en el espacio (*energía potencial*). El electrón tendría en estas órbitas una energía cinética tanto mayor cuanto más alejado estuviese del núcleo la órbita en la que girase. Su idea era aún más compleja, pues supuso que las órbitas eran elípticas, no circulares, y además el electrón giraba sobre sí mismo. Son, pues, muchas las variables que concurren en el estado de un electrón.

Para emitir su hipótesis, estudió Bohr el espectro del átomo del elemento más sencillo: el *hidrógeno*. Está este espectro formado por cuatro series de rayas fundamentales situadas en las regiones roja, verde-azulada, azul y violeta, es decir, todas en la región visible del espectro. Con un buen espectroscopio son visibles muchas más. Al hablar del espectro del hidrógeno no se tiene en cuenta que la emisión de luz de éste no se debe a la emitida por un solo átomo, sino que la emiten núcleos que no están todos en el mismo estado de transición, por lo que resulta que

la luz excitada, al ser analizada por el espectroscopio, estará constituida de muchas rayas, las cuales forman series. Esta serie de rayas llevan el nombre de sus descubridores: *Lyman*, *Balmer*, *Paschen*, *Brackett* y *Pfund*. Las de *Lyman* estaban producidas por saltos de las órbitas superiores a la fundamental,  $n = 1$ ; las de *Balmer*, a la  $n = 2$ , y así sucesivamente. La figura 1-1 nos da un esquema de los saltos posibles de los electrones activados. Se llegó a poder calcular las frecuencias  $\nu$  y, por tanto, las longitudes de onda de cada una de esas series. Las fórmulas son las siguientes:

$$\begin{aligned} \text{Serie Lyman} \quad \nu &= \frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 2, 3 \dots \\ \text{" Balmer} \quad \nu &= \frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4 \dots \\ \text{" Paschen} \quad \nu &= \frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 4, 5 \dots \\ \text{" Brackett} \quad \nu &= \frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 5, 6 \dots \\ \text{" Pfund} \quad \nu &= \frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 6, 7 \dots \end{aligned}$$

Estudiando este espectro, llegó Bohr a dar una nueva interpretación de la estructura del átomo. Supuso estaba formado por un núcleo y a su alrededor giraban los electrones en órbitas determinadas, en las cuales no emitían ni absorbían energía. La energía de estos electrones estaba cuantizada, resultando ser una cierta función de su distancia al núcleo, siendo sólo posibles determinadas cantidades de energía.

La Mecánica ondulatoria nos dice que esas distancias son las que corresponden a una densidad electrónica máxima. Las órbitas

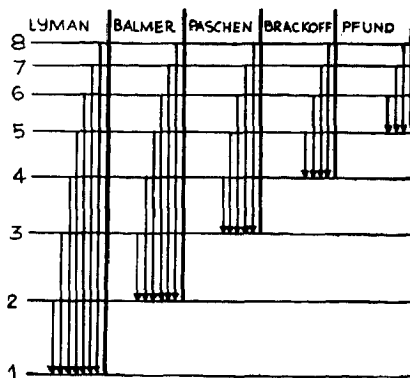


Fig. 1-1.—Saltos electrónicos para producir las rayas de la serie Lyman.

pueden ser circulares o elípticas, de excentricidades variables. En las elípticas, a los efectos de cuantificación, esas distancias se refieren al eje mayor y en las circulares al radio. Cuando existe una onda circular y varias elípticas, el radio de la circular es igual al semieje mayor de las elípticas.

Pudo Bohr explicar en esta forma el espectro del átomo de hidrógeno y también los de los iones  $\text{He}^+$  y  $\text{Li}^+$  que también tienen un solo electrón, pero no lo consiguió para los átomos con más electrones, pues en la práctica se encontraban muchas más rayas que las que predecía la teoría. Tampoco consiguió explicar el desdoblamiento de las líneas del hidrógeno cuando se opera con espectroscopios de mayor poder separador. En resumen, Bohr estableció los tres postulados siguientes:

- 1.º El electrón, al girar alrededor del núcleo, sigue la ley de Newton, y por tanto, su fuerza centrífuga es igual a la fuerza con la que le atrae el núcleo.
- 2.º El electrón sólo puede sostenerse en órbitas determinadas en las cuales no irradia energía.
- 3.º Un átomo irradia energía cuando un electrón pasa de un nivel a otro de menor energía, lo cual sucede cuando salta de una órbita a otra más cercana al núcleo. Si la energía del electrón en la órbita más cerca del núcleo la representamos por  $W_1$  y por  $W_2$  la de la órbita más alejada, la diferencia  $W_2 - W_1$  será la energía radiada.

Al nivel de energía menor se le llama nivel K; al segundo, L, y a los siguientes, M . N . O . P.

Sommerfeld modificó el modelo de Bohr suponiendo que las órbitas eran circulares y elípticas. En las elípticas el núcleo estaría en uno de sus focos. Operaba ya en un sistema de dos variables, los dos semiejes de las elipses. Tuvo entonces que introducir un nuevo número cuántico secundario o azimutal, que designo con la letra  $n_r$ ;

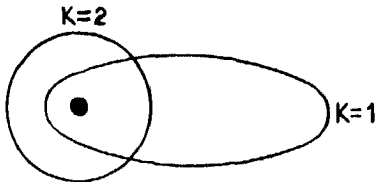


Fig. 1-2.—Órbitales Bohr, Sommerfeld para  $n = 2$ .

$$n = R \times n_r$$

Si  $K = 1$  se tiene una órbita elíptica; si  $K = 2$  se tiene una esférica, mas en este caso,  $n_r = 0$  (Fig. 1-2).

## MECANICA CUANTICA

Hoy ya no se puede estudiar la estructura de las moléculas como uniones de átomos enlazados por valencias representadas por pares de electrones. Hoy es necesario ya considerar la estructura molecular desde el punto de vista de la Mecánica cuántica.

La Mecánica clásica estudiaba el comportamiento de los núcleos y de los electrones de los átomos como si fuesen partículas microscópicas que seguían los principios y leyes de las partículas macroscópicas. De esta manera no se pudo llegar a soluciones satisfactorias. Heisenberg estudió el comportamiento de estas importantes partículas pequeñísimas, llegando a crear la Mecánica cuántica, de cuyas fórmulas se sacó conclusiones que explicaron los hechos experimentales. La interpretación de estas conclusiones no fue fácil de explicar, pero, sin embargo, fueron introducidas por los físicos, y hoy no hay más remedio que acudir a ellas, aún en estudios elementales de Química. El conocimiento que por ellas se tiene hoy de los átomos y de sus enlaces está mucho más próximo a la realidad que lo estaba con la Mecánica clásica, pues ésta no pudo dar satisfactoriamente la posición, tamaño y forma del movimiento de los electrones. En cambio, la Mecánica cuántica ha llegado a dar representaciones más satisfactorias de los mismos.

Veamos, aunque sea muy rápidamente, cuál fue el proceso científico que condujo a la Mecánica cuántica. En 1900, *Plank* introdujo la noción de *cuanto de acción*. En 1905, *Einstein* sugirió la realidad onda-partícula. En 1913, *Bohr* empleó el cuanto para emitir la primera teoría de la constitución del átomo. En 1923, *Broglie* ideó la teoría dualística onda-partícula, y en 1925, *Heisenberg* y *Schödinger* descubrieron la Mecánica cuántica, aunque cada uno en forma algo diferente.

Pasemos a estudiar brevemente estas teorías. Ya en Física de 6.º se estudió que *Plank*, para explicar la emisión o la absorción de energía por el cuerpo negro, emitió la hipótesis de que esa emisión o absorción no podía tener naturaleza continua y sólo podía tener lugar por múltiples enteros de una cierta cantidad elemental de energía representada por la ecuación  $W = h\nu$ , en la que  $h$  es una cantidad constante (*constante de Plank*), de valor  $6,62 \times 10^{-27}$  ergios  $\times$  seg.<sup>-1</sup>, y  $\nu$  la frecuencia de la radiación. La luz estaba, pues, formada por partículas de tamaño pequeñísimo, llamadas *fotones*, de manera análoga a como la electricidad está formada por electrones. Si fuese capaz el átomo de tomar cualquier cantidad de energía, al devolverla en forma de radiación, daría luz con todas las fre-

cuencias, y los espectros serían continuos, pero las luces encontradas en los espectros demuestran la existencia de diferentes niveles energéticos en el átomo.

*Einstein*, para explicar el fenómeno fotoeléctrico, emitió la hipótesis de que siendo la luz una radiación de la misma naturaleza que la calorífica, diferenciándose tan sólo de ella en la longitud de onda, debería estar como aquélla constituida por un conjunto de *cuantos de energía*, llamados *fotones*. Como se ve esta hipótesis es una generalización de la de *Planck*. En 1922, *Compton*, haciendo estudios con rayos X, descubrió que la luz, de longitud de onda suficientemente corta, al chocar con un electrón, le transmitía la energía. Esto es exactamente lo que esperaríamos de una colisión entre partículas materiales. Según *Einstein*, un cuerpo al emitir o al absorber energía sólo podría hacerlo por múltiplos enteros de  $h\nu$ . Si en la fórmula  $W = h \cdot \nu$  sustituimos  $\nu$  por su valor  $\nu = \frac{c}{\lambda}$  tendremos  $W = h \frac{c}{\lambda}$ , la cual nos dice que las luces de menor longitud de onda  $\lambda$  serán las que tendrán mayor energía. Cuando se excita un átomo, bien por calefacción o por descarga eléctrica, el núcleo permanece invariable, pero los electrones son los que captan esta energía saltando a niveles más alejados del núcleo, desde donde vuelven a su estado primitivo cediendo la energía que habían tomado en la excitación. Esta energía cedida aparece en forma de *fotones* o *cuantos de luz*. La longitud de onda de esa luz  $\lambda$  está relacionada con la energía cedida según la fórmula que vimos anteriormente. Comoquiera que las longitudes de onda de las luces emitidas por un elemento, son características de éste solo, podrán tener valores dependientes de los niveles energéticos de cada átomo. Estos niveles de energía en los que se suponían podrían estar los electrones, son discontinuos, es decir, están *cuantizados*. Si no fuese así, y fueran continuos, los espectros de los elementos estarán formados por muchas bandas y no por líneas. Todas estas consideraciones condujeron a considerar el modelo atómico como un sistema solar en el que el electrón podía girar alrededor del núcleo (Sol de este sistema) en una u otra órbita, pero incapaz de hacerlo en posiciones intermedias entre ellas.

Más tarde, *Einstein*, explicó el fenómeno fotoeléctrico, emitiendo la hipótesis de que la luz estaba cuantizada, es decir, constituida por un conjunto de partículas aisladas llamadas *fotones*. Luego, *De Broglie*, emitió la teoría de la *dualidad*, según la cual la luz puede presentar un aspecto *ondulatorio* y uno *corpúscular*, según las técnicas empleadas para



su observación. Para *De Broglie* las partículas en movimiento se pueden considerar como ondas o como partículas. Un electrón tendrá, por consiguiente, naturaleza *corpúscular* y *ondulatoria*. La longitud de onda de un corpúsculo en movimiento se podrá calcular por las mismas ecuaciones por las que se descubrió el carácter corpúscular de una onda. Para que esta teoría fuese cierta, cada órbita deberá tener un número entero de longitudes de onda. Es decir, se deberá cumplir  $2\pi r = K\lambda$ . No habrá más ondas posibles que las que cumplan con la fórmula anterior. En estas órbitas las ondas asociadas al electrón tendrán que volverse sobre sí mismas, encontrándose al final en la misma forma que al principio (figura 1-3). Las ondas en las que no se cumple esta condición, al llegar al final, en fase discordante, se destruirán. Las únicas ondas posibles asociadas al electrón serán, pues, las que lleguen al final del recorrido en la misma fase que al principio.

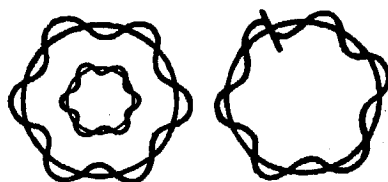


Fig. 1-3.—Las únicas ondas disponibles asociadas al electrón son las que llegan al final del recorrido en la misma fase que al principio.

Dentro de las ondas descritas por los electrones no se puede precisar dónde se encuentra el electrón. La probabilidad de encontrar estas partículas depende de la densidad de la onda.

Si, según acabamos de ver, la luz y la materia están constituidas por corpúsculos, la intensidad de una onda la dará la densidad de éstas. A mayor densidad habrá mayor acumulación de corpúsculos.

En la Mecánica cuántica no hay órbitas electrónicas sino espacios (*orbitales*) en los que la niebla es muy densa. En los orbitales no se calculan trayectorias de los electrones sino la probabilidad de la posición de éstos en un momento determinado. *Heisenberg* señaló la imposibilidad de conocer exactamente la posición del electrón (*principio de incertidumbre*). La probabilidad de encontrar a éstos la dio la Mecánica cuántica por medio de una complicadísima *ecuación diferencial* que dedujo *Schrödinger*; sus conclusiones fueron confirmadas experimentalmente. En estas complicadísimas ecuaciones, llamadas *ecuación de onda*, intervienen las magnitudes siguientes: *masa y carga del núcleo, masa y carga del electrón, distancia de éste al núcleo, energía del sistema y cuadrado de la probabilidad de encontrar al electrón en un punto cuyas coordenadas se dan*. Esta ecuación difiere de las ecuaciones corrientes en que dan varias soluciones posibles.

Las soluciones que da la Mecánica cuántica no son sencillas ni cla-

ras y sus imágenes no se pueden representar sencillamente, pero a pesar de ello hay que aceptar sus conclusiones. Los resultados a que llega son semejantes a los de *Bohr*, sobre todo en lo referente a la existencia de niveles de energía. Para la resolución de la ecuación de onda hubo necesidad de introducir constantes (que son números enteros) que se pueden identificar con los tres números cuánticos:  $n$ ,  $l$  y  $m$ . Los cálculos que exige esta ecuación son sumamente difíciles, sólo asequibles a personas especializadas y aún así sólo hasta ahora se han logrado algunas soluciones para los átomos más sencillos, *hidrógeno* y *helio*. Las soluciones de las ecuaciones no llegan a indicarnos dónde se encuentra el electrón, sino sólo la probabilidad de que se encuentre, en un momento determinado, en un cierto espacio que rodee al núcleo. Las zonas de máxima probabilidad coinciden con los extremos de los radios de sus órbitas. Por eso en lugar de la palabra *órbita*, que tendría radios fijos, se utiliza la de *orbital*, que indica un volumen dentro del cual hay la máxima probabilidad de que se encuentre el electrón. Este se mueve, pero no en un plano, sino en todo el espacio que rodea al núcleo; estará, pues, unas veces cerca y otras más alejado de él. Los *orbitales* están definidos por los números que hemos llamado *cuánticos*, representados por las letras  $n$ ,  $l$ ,  $m$  y  $s$ , cuyo significado daremos más adelante. En realidad, son los tres primeros los que determinan el estado del electrón, puesto que es necesaria la representación tridimensional para saber la posición del mismo. La representación gráfica de los orbitales no es fácil y su forma depende del valor del número cuántico,  $l$ . Los orbitales  $s$  son esféricos (fig. 1-4); los  $p$  son tres de igual forma entre ellos (ovoide), pero están colocados en distintas orientaciones. Cada orbital  $p$  está formado por dos regiones separadas por un plano (*plano nodal*), en el cual la probabilidad de encontrar a un electrón es muy pequeña. Estas órbitas, como indica la figura 1-4, son perpendiculares entre sí, formando ángulos rectos, y por eso se denominan  $P_x$ ,  $P_y$  y  $P_z$ .

Cuando se verifica una unión química entre dos átomos se produce la máxima superposición de los orbitales atómicos, es decir, una interpretación máxima de las densidades de carga de los electrones. El enlace que se produce con intervención de un orbital determinado debe encontrarse en las secciones en que estos orbitales tengan su máximo valor. Por eso los enlaces covalentes son enlaces dirigidos.

Hay dos tipos de ecuaciones de onda, la de *enlace de valencia* y la de *orbitales moleculares*. En las primeras, los átomos conservan sus características con sus electrones en sus orbitales, y en las segundas, los elec-

trones se mueven en un campo que rodea a más de un núcleo, es decir, a todos los núcleos de la molécula. En los enlaces atómicos el orbital es *monocéntrico* y en los moleculares *policéntricos*. En estos orbitales cada electrón se define como una función de onda, cuyos contornos se pueden

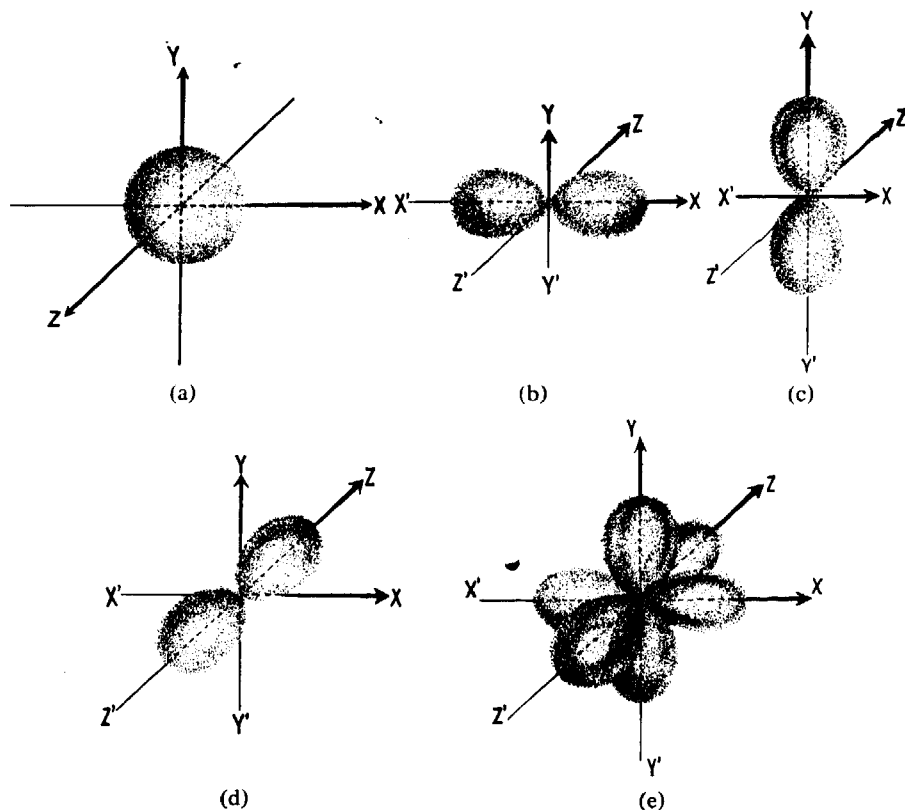


Fig. 1-4.—Formas y disposiciones espaciales de los orbitales s y p.

trazar. Cuando el orbital en el que se mueve un electrón es grande la energía es pequeña. Por eso cuando los orbitales se producen por aproximación de los electrones, éstos tendrán más libertad de movimiento y la energía del sistema se hará más pequeña. Por ello, para separar los átomos de las moléculas hay que suministrar energía tanto mayor cuanto mayor es la fuerza de los enlaces de los átomos. Hemos visto que al formarse los átomos los electrones se van situando en órbitas cada vez ma-

yores hasta llegar a formar el elemento. En las moléculas sucede también algo análogo, pero no se produce la simetría característica de los orbitales atómicos. Hay que considerar la molécula como una unidad, no como si estuviese formada por átomos unidos por valencias.

Una de las consecuencias más útiles de la ecuación de ondas ha sido la de expresar la energía del electrón en función de los números  $n$ ,  $l$ ,  $m$  y  $s$ , que hemos llamado *números cuánticos*, además de otras cantidades como ya dijimos en la página , como carga del electrón, masa del núcleo, etc. Estos números cuánticos reciben las siguientes denominaciones:

$n$	número	cuántico	principal
$l$	"	"	secundario
$m$	"	"	magnético
$s$	"	"	de espín

Veamos el significado de cada uno de ellos:

- $n$  representa el número de veces que un electrón cabe en la órbita; es, pues, una medida aproximada de la región que el electrón ocupa. Cuanto mayor sea tanto mayor será la nube.
- $l$  se llama número cuántico *azimutal* u *orbital*. Define la forma de la nube (si es esférica o alargada, o de forma más o menos complicada). Cuanto mayor es el número  $l$  tanto más complicada es la forma de la nube. Puede tomar todos los valores comprendidos entre 0 y  $n - 1$ , ambos inclusive. Si  $l = 0$  la nube tiene simetría esférica (fig. 1-5); si  $l = 1$  tiene forma aproximada de un cacahuet; si  $l = 3$  tiene forma de roseta. Cuanto más valor tiene más complicada resulta la forma de la nube.

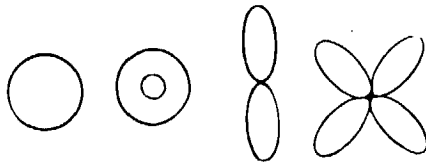


Fig. 1-5.—Forma que toman las orbitales según los valores de los números contrarios  $n$  y  $l$ .

- $m$  designa la orientación de la órbita en el espacio, principalmente cuando está sometida a un campo magnético exterior. La orientación de-

pende de la forma de la nube. La causa es que al moverse el electrón en su órbita creará corrientes eléctricas, y por ello se orientará en el campo magnético (figura 1-6). En ausencia de campos magnéticos los átomos que sólo se diferencian en el valor de  $m$  no se podrán diferenciar entre sí;  $m$  será un vector que tomará en el espacio distintas direcciones.

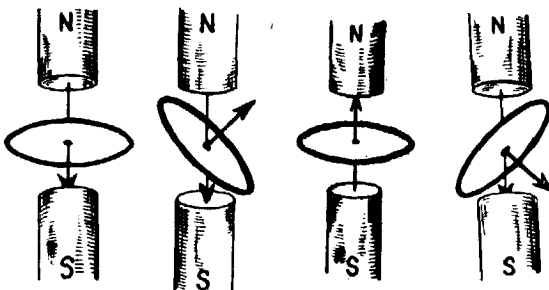


Fig. 1-6.—Orientación de la órbita en un campo magnético.

El eje normal del orbital  $n$  puede aceptar todos los valores enteros y

positivos, y  $l$  sólo los valores 1, 2, 3, ... *Bohr* suponía que en cada nivel energético había una sola órbita, lo cual es cierto para el hidrógeno, en el cual  $n = 1$ , y por ello los resultados experimentales estaban de acuerdo con lo expuesto, pero *Sommerfeld* admite puede haber varios subniveles con valores energéticos muy parecidos entre sí. Por ello, cuando un electrón cae de un nivel superior a uno inferior (de  $n = 4$  a  $n = 3$ , por ejemplo), podrá hacerlo en cualquiera de los orbitales que hay en este nivel, desprendiendo en cada salto distinta energía y, por tanto, produciendo en el espectro distintas líneas. Pero la complejidad es aún mayor, pues dedujo mecánicamente que las órbitas del electrón se mueven con movimiento de rotación en un plano (fig. 1-7), de tal manera que el eje mayor gira en torno del núcleo. También es posible un movimiento de balanceo (como el del trompo). El eje de éste, sabemos por Física, no permanece en reposo, sino que describe un cono circular (figura 1-8). Este movimiento se llama de *precesión*. El número cuántico correspondiente, como este movimiento se realiza cuando el átomo se halla en un campo magnético se llama *número cuántico magnético*.

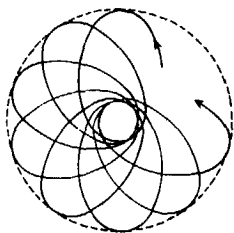


Fig. 1-7.—Las orbitales se mueven de forma que su eje tome un movimiento de rotación al centro del núcleo.

El movimiento de que hablamos tendrá un *momento magnético* y una energía cuantificada y sólo podrán existir determinadas elipses, estando

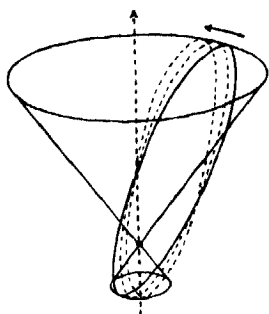


Fig. 1-8.—El eje del trompo no permanece en reposo, sino que describe un eje circular.

descartadas las demás. El momento cinético  $K \frac{h}{2\pi}$  podrá tomar los valores  $K = 1, 2, \dots, n$ . Las excentricidades de las elipses irán disminuyendo a medida que crece  $K$ . Cuando  $K = n$  la elipse será una circunferencia.

Para designar los electrones de una capa se utiliza el número cuántico principal correspondiente.

número cuántico principal: 0 1 2 3  
 letra a que corresponde: s p d f (1)

De estos orbitales los que interesan más, en Química Orgánica, son los s y los p.

La energía de estos orbitales sigue el siguiente orden:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p$$

por ello cuando un electrón salta de un orbital a otro cualquiera la energía de éste, bien absorbiendo energía (en forma de cuantos) si pasa a uno de mayor energía o bien emitiéndola si pasa a uno de menor energía.

*Valores que pueden tener los números cuánticos*

$n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ , según se cuentren en la capa K, L, M, N, O;

$l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots, n - 1$ ;

$m = -l$ ;

$$s = +\frac{1}{2} \quad ; \quad -\frac{1}{2}$$

## NUMEROS ATOMICOS

Recordemos que el número atómico  $Z$  es el número de electrones que tiene un átomo, igual al número de cargas positivas del núcleo, y que

(1) Estas letras indican la clase de líneas:  $s$  de Sharpe = nitida;  $p$  de principal;  $d$  de difusa, y  $f$  de fundamental. No tienen hoy ningún significado real pero continúan usándose

este número caracteriza a cada elemento químico. El número  $Z$  varía de unidad en unidad, desde 1 para el hidrógeno hasta 103 para el lowrencio (Lw). La distribución de esos electrones en un átomo neutro, con sus electrones no excitados, es decir, en estado estacionario fundamental, es la siguiente:

*Hidrógeno* (H)  $Z = 1$ . Tiene un electrón que ocupa un nivel  $n = 1$ , o sea, que tiene un solo orbital,  $s$ .

*Helio* (He)  $Z = 2$ . Tiene dos electrones en la capa  $s$ .

*Litio* (Li)  $Z = 3$ . Tiene dos electrones en la capa  $s$  y uno en la  $n = 2$ .

Para escribir la estructura electrónica de un átomo, se escribe poniendo primero el número que representa el nivel energético y después la letra que representa el subnivel, con un exponente que indique el número de electrones que tiene. Así,  $1s^2$ ,  $2s^2$ ,  $2p^2$  representa el átomo de carbono, que tiene 2 electrones en el subnivel  $1s$  del primer nivel energético, o sea de valor  $l = 0$ ; 2 en el subnivel  $2s$  y 2 en el  $2p$  (valor de  $l = 1$ ).

En el cuadro adjunto damos cuenta de la constitución de los diez primeros elementos de la tabla periódica.

$Z = 1$  , H ,  $1s^1$   
 $Z = 2$  , He ,  $1s^2$   
 $Z = 3$  , Li ,  $1s^2$  ,  $2s^1$   
 $Z = 4$  , Be ,  $1s^2$  ,  $2s^2$   
 $Z = 5$  , B ,  $1s^2$  ,  $2s^2$  ,  $2p^1$

$Z = 6$ , C , $1s^2$ , $2s^2$ , $2p^2$
--

$Z = 7$  , N ,  $1s^2$  ,  $2s^2$  ,  $2p^3$   
 $Z = 8$  , O ,  $1s^2$  ,  $2s^2$  ,  $2p^4$   
 $Z = 9$  , F ,  $1s^2$  ,  $2s^2$  ,  $2p^5$   
 $Z = 10$  , Ne ,  $1s^2$  ,  $2s^2$  ,  $2p^6$

Llamamos la atención sobre el carbono por ser el elemento principal en Química Orgánica.

Vemos en el cuadro anterior que de igual manera a como en la Física clásica al estudiar la distribución y número de electrones de las órbitas de los elementos, no aparecen electrones en nuevas órbitas hasta que no están completas las anteriores, igual sucede con los orbitales. Un electrón no ocupa un orbital  $p$  hasta que el  $2s$  no tiene dos electrones. Aquí se

cumple también el Principio de Exclusión, de *Pauli*, de que cada orbital con dos electrones, éstos tienen que tener *espines* opuestos. Tanto la teoría clásica como la moderna exigen el apareamiento de los electrones.

## CARBONO

### EL ATOMO DE CARBONO

Según la teoría moderna, a la capa K antigua le corresponde el orbital *s*, a la L los *2p*, a la M los *3s* y *3p*, etc.

El átomo de carbono en su estado normal (estado de reposo) sabemos tiene 6 electrones en total. De ellos 4 están en el nivel *s* y 2 en el *p*. La distribución es la siguiente:

Orbitales	$1s^2$	$2s^2$	$2p^1_x$	$2p^1_y$	En total: 6
Número de electrones	2	2	1	1	

Con esta estructura hay que explicar la tetravalencia del átomo de carbono que, como sabemos, requiere cuatro electrones externos no apareados. Ya dijimos antes que los electrones *s* son los que corresponden a la capa que antes se llamaba K. Los orbitales de estos electrones tienen simetría esférica (fig. 1-9), queriendo esto decir que la región del espacio donde hay mayor probabilidad de encontrar al electrón es en una esfera en cuyo centro se encuentra el núcleo. De estos electrones los hay de diferente número cuántico. Los elementos que utilizan electrones *s* para su unión con otros elementos forman *uniones lineales*. Los electrones del orbital *2s* tienen un radio mayor que los del orbital *1s* (como se ve en la figura 1-10); y lo mismo sucede

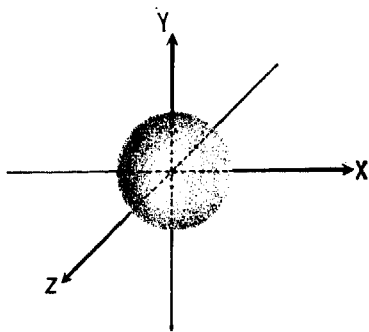


Fig. 1-9.—Forma del orbital *s*.

con los  $3p$ , en relación con los  $2p$ . Los orbitales *p* ( $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$ ) tienen forma ovoide (fig. 1-4 (b), (c) y (d)). Vistos en conjunto ofrecerían el aspecto de la figura 1-4 (pág. 11).



Cuando a un átomo de carbono se le aproxima un grupo adicional positivo, se excita y uno de los electrones del tipo  $2s$ , cuya nube es de forma esférica, pasa a ocupar el orbital  $2p_z$ . La energía necesaria para ello es de unos 90 K-cal/mol., quedando entonces la constitución electrónica del átomo de carbono de la manera que indicamos antes.

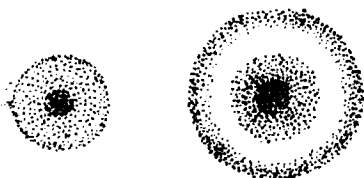


Fig. 1-10.—Orbitales  $s$  en el de carbono.

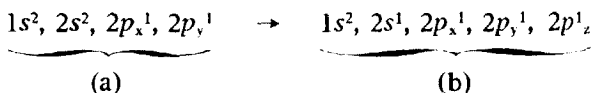


Fig. 1-11.—Estructura del átomo de carbono (a) en estado de reposo y (b) en estado excitado.

Se dice que el electrón  $2s$ , que pasó a  $2p_z$ , se ha promovido, se ha elevado de nivel. En esta disposición excitada quedan aún sin aparear tres electrones  $2p$ , uno a cada una de esas orbitales y además en el  $2s$  uno, es decir, quedan en total *cuatro* electrones sin aparear. Estos electrones no apareados son precisamente los que forman los orbitales con los electrones de otros átomos. Ahora bien, las direcciones en que se forman estas uniones (valencias) no coinciden con las direcciones de las cuatro nubes electrónicas originales.

*Pauling* ha supuesto que los orbitales que intervienen en la formación de uniones químicas no son orbitales  $s$  y  $p$ , sino orbitales mixtos obtenidos por una combinación de éstos. Se dice entonces que estos orbita-

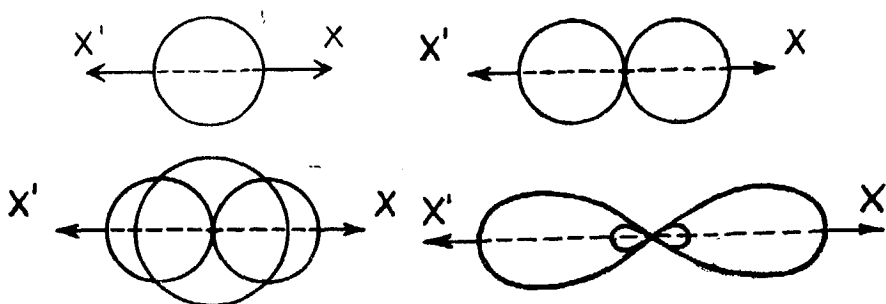


Fig. 1-11 (a).—Hibridación de electrones  $2s$  y  $2p_x$ .

les se han *hibridizado* (1). El híbrido no es una mezcla de las dos configuraciones, sino que tiene nuevas y distintas propiedades. Al pasar el electrón  $s$  al orbital  $p$  se forma una unión más fuerte de la que sería la unión  $s-s$  o la  $p-p$ . Los enlaces híbridos constituyen un nuevo tipo de enlace, pues se orientan en el espacio de maneras distintas a la que tenían los orbitales que les han formado.

Supongamos primero que hibridamos los electrones  $2s$  y  $2p_x$ , quedando los electrones  $2p_y$  y  $2p_z$  sin perturbar (fig. 1-11).

Como vemos ha dado lugar a la formación de dos orbitales colineales equivalentes, quedando los electrones  $2p_y$  y  $2p_z$  sin perturbar. Al unir-se dos orbitales químicamente, se superponen lo más posible, o sea, que se interpenetran de forma que sus densidades de carga sean máximas, por lo que supongamos ahora una hibridación más compleja, la trigonal de un orbital  $s$  y dos  $p$  ( $p_x$  y  $p_y$ ) (fig. 1-12).

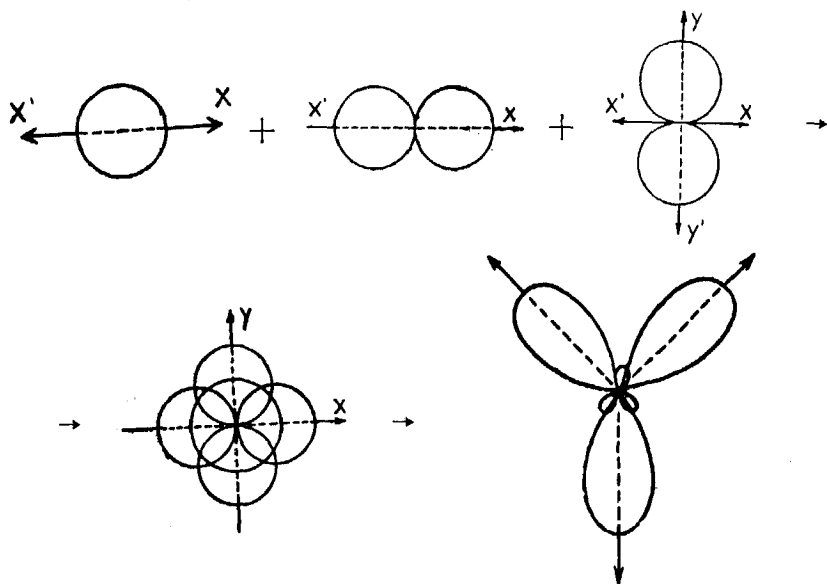


Fig. 1-12.—Representación de la hibridación de un orbital  $s$  y dos  $p$  ( $p_x$  y  $p_y$ ).

Resultan orbitales coplanares equivalentes que forman ángulos de  $120^\circ$ , quedando sin perturbar el orbital  $2p_z$ .

(1) La hibridación tiene alguna analogía con un caso natural, el cruce de una burra con un caballo, que da una mula, animal que no tiene las propiedades de sus padres; es vulgar, lánguida y resistente al calor.

Los orbitales híbridos están más concentrados en la dirección de unión (que es eje de rotación simétrico), y por ello se sobrepondrán más fácilmente a la de otro átomo formando una unión más fuerte. Estas hibridaciones se producen para hacer máxima la energía de unión. La hibridación es posible por la existencia de huecos en los orbitales. Nuestra imaginación no puede imaginarse bien este hecho. El uso de modelos geométricos para representar expresiones matemáticas (de la Mecánica cuántica), no es fácil de entender. Sin embargo, estas representaciones tienen un enorme valor pedagógico, y nosotros las emplearemos siempre que veamos alguna posibilidad de que expliquen algunos hechos experimentales.

Los electrones  $2s^1$ ,  $2p_x^1$ ,  $2p_y^1$ , y  $2p_z^1$  tenderán a repelerse unos a otros, pues la realidad es que son espacios con cargas negativas. A causa de esta repulsión es por lo que los orbitales adoptan la forma tetraédrica. Tienen estos orbitales híbridos máximos en dirección bien definidas y en ellas pueden superponerse con los orbitales de los elementos con los cuales entran en reacción. Ya hemos visto cómo en la hibridación  $s, p$  se cambian las formas de los orbitales (figs. 1-11 y 1-12).

Los cuatro orbitales que se forman en el átomo de carbono que ha sido excitado, son los que dan al átomo de carbono la capacidad para formar *cuatro enlaces covalentes puros*, que están dirigidos hacia los vértices de un tetraedro regular en cuyo centro se encuentra el átomo de carbono. (Fig. 1-13).

Como ya dijimos anteriormente, la orientación de los orbitales resultantes de la hibridación es diferente de la que tenían los orbitales que las han formado. Estos orbitales híbridos están formados por electrones no apareados, por lo cual tendrán tendencia a formar orbitales con electrones de otros átomos.

Los planos que pasando por el núcleo, que son perpendiculares a las líneas en las que se encuentran los orbitales, se llaman *planos nodales* y en ellos, como ya hemos dicho anteriormente, es muy poco probable se encuentren electrones.

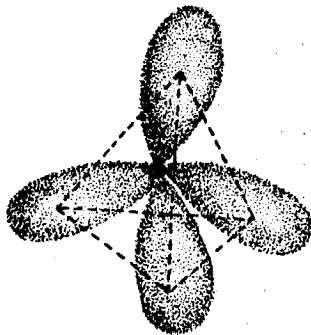


Fig. 1-13.—Formación tetraédrica de las cuatro covalencias del átomo de carbono cuando ha sido excitado.

Las nubes electrónicas hibridadas varían de forma al formar compuestos covalentes con otros cuerpos, pues los núcleos positivos de estos

átomos ejercen atracción sobre ellas. Las nuevas formaciones fueron deducidas por la Mecánica cuántica. En el metano  $\text{CH}_4$  los átomos de hidrógeno se sitúan en los vértices de un tetraedro (fig. 1-14). Las uniones formadas entre el átomo de carbono y los átomos de hidrógeno se llaman uniones sigma ( $\sigma$ ). Esta estructura está comprobada por el método de difracción de rayos X.

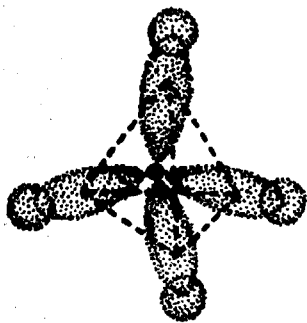


Fig. 1-14.—Representación de los orbitales en la molécula del metano.

Las uniones  $\sigma$  del carbono con el hidrógeno tienen carácter covalente, que es, como dijimos al principio, el carácter de todas las combinaciones orgánicas.

El carbono es el elemento que muestra mayor tendencia a formar moléculas eléctricamente neutras.

Esta ordenación tetraédrica regular de los orbitales del átomo de carbono en el compuesto metano (ángulos de  $109^\circ 28'$ ), no se verifica en todos sus compuestos. Por ejemplo, en el cloroformo ( $\text{CHCl}_3$ ) los ángulos son de  $110^\circ$  y en el dimetil-metano ( $\text{CH}_3)_2\text{CH}_2$  son de  $122^\circ$ .

En las teorías modernas, según acabamos de ver ya, al hablar de enlaces no se habla de pares de electrones, ni de valencias dirigidas, sino de ordenación de orbitales con el mínimo de energía.

## ESTRUCTURA ATOMICA DEL DIAMANTE Y DEL GRAFITO

Bragg, por estudios de difracción de rayos X, demostró que la red del *diamante* es cúbica. Cada átomo ocupa el centro de un tetraedro regular (fig. 1-15), cuyos vértices están ocupados por otros cuatro átomos y cada uno de éstos a su vez enlazado con otros cuatro y así sucesivamente. La distancia C-C es de  $1,54 \text{ \AA}$ . Con los átomos de carbono se pueden formar anillos hexagonales de seis átomos pero no planos (fig. 1-17). El cristal que se forma es gigante. Esta estructura del diamante está de acuerdo con todas sus propiedades. El diamante es muy duro, lo cual es debido precisamente a la magnífica simetría tetraédrica de sus enlaces que hacen que sus átomos se mantengan firmes en sus puestos cuan-

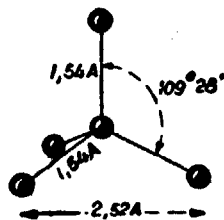


Fig. 1-15.—Dirección tetraédrica de las valencias diamantinas del carbono y sus tamaños.

do se pretende separarlos; por ejemplo, rayarlos. La tetravalencia del carbono se explica perfectamente también por esa estructura tetraédrica. La fusión de ese cristal requiere la rotura de los fuertes enlaces covalentes

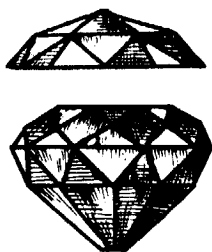


Fig. 1-16.—Crystal de diamante tallado.

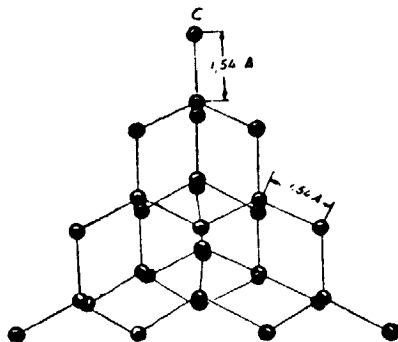


Fig. 1-17.—Los carbonos en el diamante adoptan figura tetraédrica.

que se extienden por todo el cristal en las tres dimensiones del espacio, explicándose así su elevado punto de fusión ( $3.600^{\circ}$ ).

Puesto que el átomo tiene ocupados los cuatro electrones que rodean a su núcleo no quedan electrones libres, y por ello el cristal no es conductor de la electricidad.

Los átomos de carbono en el grafito están dispuestos en forma de red plana hexagonal, siendo la distancia C-C de  $1,43 \text{ \AA}$  (fig. 1-18). Compárese con la distancia de los átomos de carbono en el diamante. Por tan-

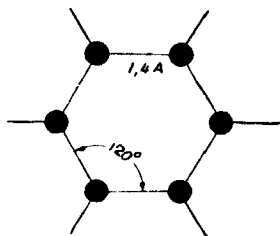


Fig. 1-18.—Los anillos hexagonales son planos; las distancias entre carbonos son de  $1,41 \text{ \AA}$ .

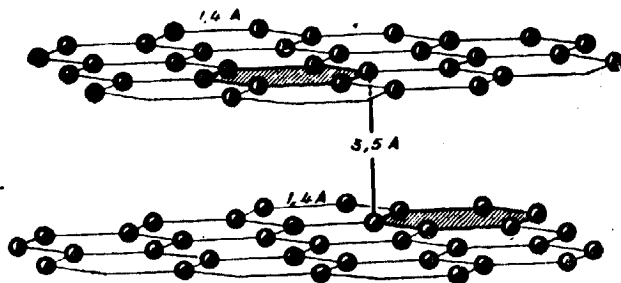


Fig. 1-19.—El grafito tiene una estructura hexagonal en capas planas, que están ligadas entre sí por fuerzas mucho menores que las que unen los átomos de cada capa. Por eso el grafito es una sustancia que al machacarla se reduce a hojitas muy delgadas, pero no se pulveriza.

to, la unión entre los átomos de carbono es muy fuerte. Estas redes planas se colocan unas encima de otras, en hojas superpuestas, separadas por grandes distancias ( $3,5 \text{ \AA}$ ) (fig. 1-19). Esta distancia superior al doble del radio covalente del carbono hace que la fuerza de unión de estas hojas sea muy pequeña. Los electrones de los átomos de las hojas no están acoplados a un solo ciclo hexagonal, sino que pueden desplazarse por toda la capa. La gran distancia a que se encuentran las hojas se refleja en la pequeña densidad del grafito (2,1), mientras que la del diamante es mayor (3,5). Tres átomos de un hexágono se proyectan sobre tres de la lámina inmediata y los otros tres se proyectan en el centro de las mallas hexagonales.

Como las fuerzas que unen unas capas con otras son débiles, se pueden separar fácilmente, resbalando unas sobre otras. Es sabido que el grafito tiene propiedades lubricantes muy notables.

Cada átomo de carbono en el grafito tiene tres átomos ligados a él, lo cual supone tres valencias homopolares, o sea tres electrones repartidos, quedando, pues, al átomo de carbono un electrón libre. A la existencia de ese electrón libre se atribuye la conductibilidad eléctrica del grafito en el sentido de las capas, análoga a la de los metales, pero en cambio es un aislante en sentido perpendicular a ellas.

## ENLACES SENCILLOS ENTRE ATOMOS DE CARBONO

En la Física clásica la unión sencilla entre dos átomos de carbono, es decir, por una sola valencia ( $> \text{C}-\text{C} <$ ) se suponía producida al formarse una órbita común para los dos átomos, en la que interviniese un electrón de cada átomo. Los dos átomos cooperaban, pues, uno sobre el otro para producir la fuerza atractiva. El par de electrones resultaba así compartido por los dos átomos (fig. 1-20) y pertenecían por igual a los dos núcleos. Las órbitas se superponían dando lugar a una órbita molecular cuya mayor densidad estaba entre los dos núcleos. Esta teoría no daba explicación sobre la naturaleza de las fuerzas puestas en juego.

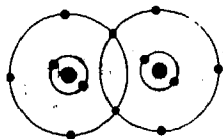


Fig. 1-20.—Los dos átomos comparten los electrones. En cada átomo de carbono le quedan tres valencias libres.

Hoy se sugiere que la unión sencilla, por una sola valencia, entre átomos de carbono, se debe a la interpenetración de los lóbulos orbitales de las dos nubes electrónicas de los electrones llamados  $\sigma$ ,

por lo que la unión se llama *unión sigma*. Los orbitales se interpenetran de tal manera que las mutuas repulsiones de los dos núcleos de los átomos, así como las de otras nubes eléctricas negativas, están compensadas por las mutuas atracciones de los núcleos positivos con las nubes electrónicas negativas.

Ahora bien, esa interpretación de los dos orbitales da lugar a un orbital único con un nivel energético inferior al de los orbitales atómicos cooperantes. Las cargas eléctricas pueden encontrarse en la región intermedia entre los átomos y entonces la unión de los mismos es fuerte, enlace  $\sigma_g$  (fig. 1-21) o pueden efectuar la unión formando un orbital de nivel energético superior al de los orbitales constituyentes, distribuyéndose la carga electrónica fuera de la región internuclear (fig. 1-21), por lo que resulta un plano nodal que se encuentra a distancia intermedia entre A y B. Estos átomos se repelerán. Ese orbital molecular se llama *antienlazante*  $\sigma_n$ . En estos dos tipos, los orbitales *enlazantes* y *antienlazantes* están constituidos por electrones *s*. Para que se verifique esta unión las energías de los orbitales deben ser aproximadamente iguales.

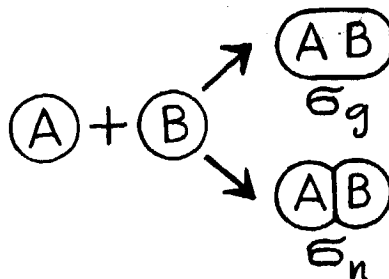


Fig. 1-21.—Formación de orbitales enlazantes o antienlazantes.

También la unión de electrones  $2p$  da lugar a orbitales tipo  $\pi_g$  y  $\pi_n$  (fig. 1-22). El orbital  $\pi_h$  tiene un plano nodal y el  $\pi_g$  dos de forma que la unión de los orbitales  $\pi_n$  para dar la unión  $\pi_g$  es la que correspondería a dos salchichas con sus ejes paralelos a la línea recta que une a los núcleos de los átomos.

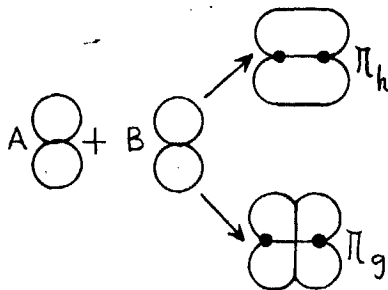


Fig. 1-22.—Formación de orbitales tipo  $\pi_h$  y  $\pi_g$  con electrones  $2p$ .

Debe de tenerse en cuenta que a medida que se eleva el número de nodos en un enlace, se eleva el nivel energético (con absorción o con emisión de luz). Un estado  $g$  puede pasar a  $u$  o viceversa. Lo que no puede haber es el paso de un estado  $g$  a otro  $g$  o de uno  $u$  a otro  $u$ .

Vamos ahora a explicar la unión con electrones  $p$  (fig. 1-23). Se verifica entonces una interpenetración de los lóbulos orbitales formando una unión  $\sigma$ . La región comprendida entre los dos núcleos es la de mayor densidad de carga y la que queda en la parte externa es la componente *antienlazante*. A mayor interpenetración de dichos orbitales más fuerte será la unión de los átomos.

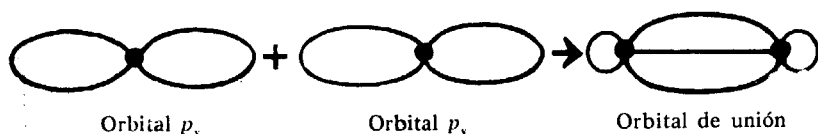


Fig. 1-23.—Unión de dos orbitales  $p$ .

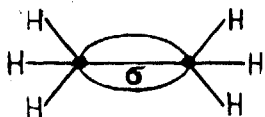


Fig. 1-24.—Representación del etano.

De acuerdo con las anteriores consideraciones, el etano se representa en la forma de la figura 1-24. En esta unión sencilla los átomos de carbono pueden girar alrededor de la línea de unión.

Por el principio de exclusión de *Pauli*, esta interpenetración de los orbitales sólo puede realizarse entre átomos

adyacentes si los electrones tienen espines opuestos.

Uno cualquiera de esos átomos de carbono unidos en la forma antes indicada, puede unirse a un tercer átomo de carbono, de una manera análoga, obteniéndose así la serie de hidrocarburos de cadena acíclica.

La distancia a que quedan los átomos de carbono en esta unión sencilla es de  $1,54 \text{ \AA}$  (1). Esta distancia ha podido ser medida por estudios hechos de los espectros de difracción (de estos cuerpos), producidos por rayos X, o por haces electrónicos. Estos métodos no son capaces de descifrar estructuras desconocidas, y por ello se emplean sólo cuando los químicos han establecido éstas, sirviendo de comprobación a las mismas. Hay también métodos indirectos, como los de absorción en el infrarrojo, y el de los momentos dipolares.

(1) Los átomos no son esferas duras, sino blandas y por ello cuando se juntan y se atraen se comprimen disminuyendo la distancia a que se concentran sus centros.



Si los átomos que tienen un enlace  $\sigma$  se separan resultarán dos nubes esféricas más pequeñas (como sucede cuando una gota se separa en dos. Claro que el proceso es mucho más complejo que éste).

### ENLACE DOBLE ENTRE ATOMOS DE CARBONO

La unión doble entre átomos de carbono ( $>C=C<$ ) significaba en la Mecánica clásica la interacción de cuatro electrones, dos de cada átomo (fig. 1-25). Esta unión no quiere decir que dicho enlace signifique la duplicidad de un enlace sencillo. La medida de la energía del enlace sencillo es del orden de 83 Kcal/mol mientras que la del enlace doble es de 143 Kcal/mol, es decir, menor en 23,3 Kcal/mol, en el doble que en dos uniones sencillas.

Esto puede tener una explicación suponiendo que uno de los enlaces simples que constituyen el doble sea más débil que el otro. Esos dos enlaces no son, pues, iguales, sino diferentes. Uno de ellos es sencillo y de la misma naturaleza que el que explicamos antes (unión  $\sigma$ ) y el otro es más débil. Este hecho está también confirmado experimentalmente, pues se han medido las distancias que separan los átomos de carbonos unidos por valencia simple (C-C), encontrando el de 1,54 Å' y la de átomos de carbono unidos por valencias dobles (C=C) encontrando 1,33 Å', es decir, menor (fig. 1-26). Esto explica que uno de los enlaces sea más débil que el otro. Esto puede ser debido a que al formarse el segundo enlace se debilita el primero o a que este segundo sea más débil que aquél. Las propiedades químicas demuestran que esta segunda suposición es la verdadera. Al formarse el segundo enlace, llamado *enlace  $\pi$* , la fortaleza de unión de los átomos de carbono no se duplica, pues este segundo enlace  $\pi$

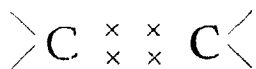


Fig. 1-25.—La unión doble entre átomos de carbono significa la interacción de cuatro electrones.

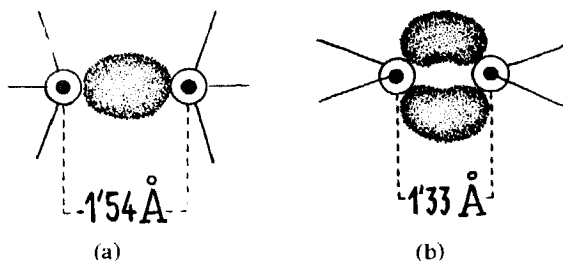


Fig. 1-26.—Distancias entre dos átomos de carbono

es más débil que el primero  $\sigma$ . Por ello, al reaccionar el cuerpo que tenga este tipo de unión doble, entre dos átomos de carbono, el enlace que se rompe primero es el enlace  $\pi$ .

La Mecánica cuántica ha demostrado que la doble unión de los átomos de carbono se produce al haber una *hibridación trigonal no tetraédrica* de los orbitales  $2s$ ,  $2p_x$  y  $2p_y$ , de la cual resultan tres orbitales que están en el mismo plano (*coplanares*) equivalentes, que forman entre sí ángulo de  $120^\circ$  y están situados en el plano X Y. El orbital restante,  $2p_z$ , permanece sin perturbar. Se habrán, pues, formado tres valencias equivalentes en el plano X Y y una cuarta en un plano perpendicular al X Y.

La hibridación de un orbital  $s$  con uno  $p$  está representado en la figura 1-27. Uno de estos orbitales híbridos,  $sp$ , forma la unión entre los átomos de carbono del tipo corriente y las otras dos forman la unión con los átomos de hidrógeno. Verificada esta unión le queda a cada átomo de carbono el orbital  $2p_z$  (figura 1-28). Se produce entonces una interacción entre ellos formando una nube arriba y otra abajo del plano X Y.

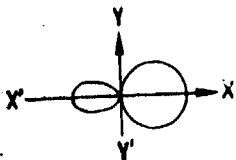


Fig. 1-27.—Hibridación de un orbital  $s$  con el  $p_x$ .

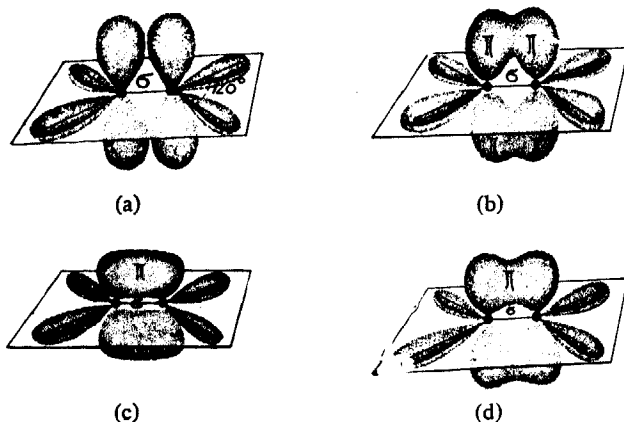


Fig. 1-28.—Formación de la segunda unión entre los átomos de carbono. En (a) se representan los orbitales  $p_z$  separados, en (b) se representa la interacción entre esas nubes, orbitales  $p_z$  en (c) se han fraccionado formando ya dos nubes, una abajo y otra arriba del plano X e Y y en (d) está ya completamente formado la unión  $\pi$ .

En la figura 1-29 se ve con más claridad cómo se ha formado la unión  $\sigma$  y cómo va a formarse la misma  $\pi$ . Los orbitales, como se ve, son perpendiculares entre sí. La densidad de esas dos nubes es nula en el plano X Y. Esas dos nubes pertenecen al mismo orbital y no pueden considerarse separadamente. Se ha formado, pues, una segunda unión entre los átomos de carbono, unión  $\pi$ , que es más débil que la unión  $\sigma$ , lo cual explica el que la molécula del etileno sea más reactiva que la del etano, pero al mismo tiempo hay que hacer resaltar que la aparición del enlace  $\pi$  hace aproximarse a los átomos de carbono. Se indica esta separación en la figura 1-6.

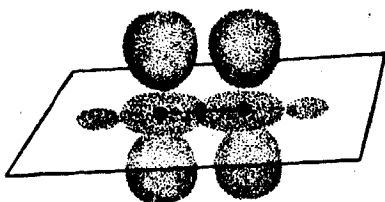


Fig. 1-29.—Formación de los orbitales  $\pi$  entre dos átomos de carbono.

El enlace  $\pi$  es más débil que el  $\sigma$  (la energía asociada a la unión  $\sigma$  es de 80 Kcal/mol, mientras que la asociada a una unión  $\pi$  es de unas 60 Kcal/mol), lo cual explica que la molécula del etileno tenga más reactividad que la del etano y esto sucederá lo mismo con los cuerpos que tenga una u otra unión.

La doble ligazón se polariza fácilmente. Esto explica la tendencia a una unión  $\sigma$ , más estable con otros átomos. Por eso se llaman también los electrones *electrones no saturados*.

Con el doble enlace no hay probabilidad de que la molécula gire alrededor de la unión entre dos carbonos, pues este giro daría lugar a la recomposición de los orbitales  $2p_z$  y se rompería el enlace.

Es importante volver a llamar la atención de que este doble enlace tiene en la molécula dos regiones de carga eléctrica, una abajo y otra arriba del plano X Y. Es también importante señalar que estas dos nubes de carga pertenecen al mismo orbital, no pudiéndose considerar separadamente.

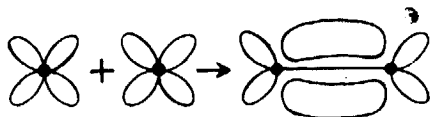


Fig. 1-30.—Formación del doble enlace al unirse dos átomos de carbono.

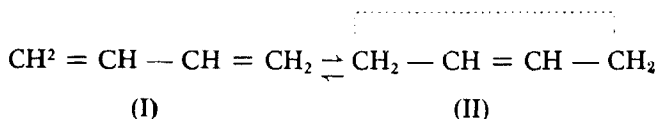
Si las nubes que quedan a cada átomo de carbono se unen con átomos de hidrógeno tendremos la fórmula del *etileno*.

## HIDROCARBUROS ETILENICOS CONJUGADOS

Se llaman uniones etilénicas conjugadas las de una cadena de átomos de carbono que tenga enlaces dobles entre carbonos separados por enlaces sencillos. El cuerpo más sencillo que tiene esta clase de unión es el *butadieno*.



Todos los átomos de este cuerpo están situados en un mismo plano, aunque no en línea recta sino en zig-zag. Las distancias entre los átomos de carbono que tienen enlace doble 1-2 y 3-4 es algo menor que la que existe entre átomos que tienen enlace sencillo 2-3, en este caso. Ello se debe a la distribución en el espacio de los electrones que producen esta clase distinta de uniones. Se ha encontrado también que el calor de hidrogenación de un enlace doble, en este cuerpo, es de 3,5 Kcal/mol, cantidad menor que la que corresponde a un enlace doble aislado en una cadena carbonada. Estos hechos, encontrados experimentalmente, llevaron a la idea de que las uniones dobles, en esta clase de hidrocarburos conjugados, *tienen algo del carácter de las sencillas* y las *sencillas de las dobles*. Esta hipótesis condujo a que se considerara la estructura del butadieno como una estructura *resonante* entre las dos siguientes:



La denominación de estructura *resonante*, aunque está muy extendida, no es muy apropiada, pues la palabra resonante parece sugerir la idea de vibración. Tendría, pues, que haber una oscilación rápida entre las dos estructuras. En realidad, la molécula resultante tiene propiedades de una y de otra estructura, aunque no en la misma proporción, pues se parece más a la estructura (I) que a la (II). Este fenómeno se conoce también con el nombre de *mesomería* (*meso* = significa la idea de situado entre).

En la mayor parte de los cuerpos que sólo tienen un doble enlace es posible emplear satisfactoriamente la fórmula de *Lewis*, pero en los hidrocarburos etilénicos conjugados no da resultados satisfactorios. Para explicar sus propiedades hay que acudir a la noción de orbitales de la Me-

cánica cuántica. En ésta la representación deberá ser la de la figura 1-31, pero si tenemos en cuenta lo que antes hemos dicho, que el enlace do-

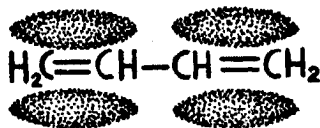


Fig. 1-31.—Orbitales en la molécula del butadieno.

ble tiene un cierto carácter del sencillo y éste del doble, se ideó la representación de la figura 1-32, en la cual se supone hay nubes electrónicas arriba y abajo de todas las uniones, sean simples o dobles. Esto su-

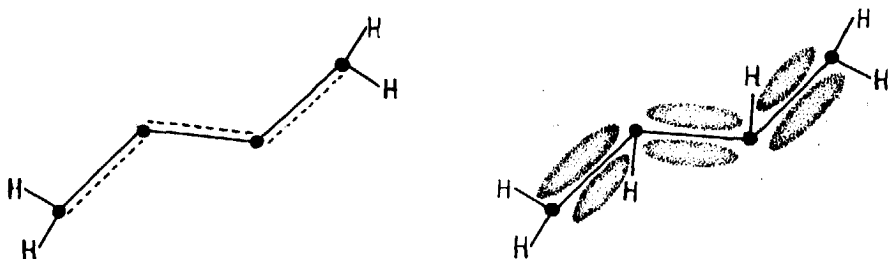


Fig. 1-32.—Orbitales de todas las uniones sean simples o dobles.

pone que ninguno de los electrones  $\pi$  pertenecen sólo a un átomo de carbono, sino que forman, como indica la figura 1-33, una nube extendida a todo lo largo de la cadena carbonada.

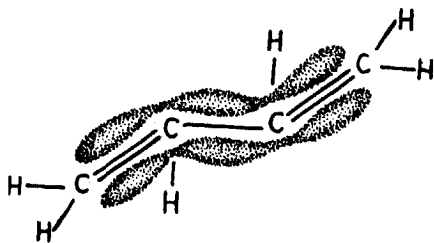


Fig. 1-33.—Existe una nube extendida a lo largo de toda la cadena.

Consideremos ahora en particular la estructura del butadieno, según esta teoría de los orbitales *moleculares*. Todos los átomos de este cuerpo tienen disposición trigonal. En la figura 1-34 están representados los orbitales de los electrones  $p_z$  que corresponden a cada átomo de carbono. Cuando se forman las uniones correspondientes al butadieno, la nube electrónica del átomo de carbono  $C_2$  se superpone a la del  $C_1$  y la de  $C_3$  en la de  $C_4$ , por lo cual podemos considerar que esos cuatro orbitales  $p_z$  forman uno solo (orbital molecular), extendido sobre los cuatro átomos de carbono (fig. 1-35 (a)). En este estado, los orbitales  $p_z$  no están reducidos a la región entre dos núcleos de los átomos de carbono. Ya no forman un enlace *localizado*, sino uno *deslocalizado*.

Si consideramos los orbitales  $p_z$ , en un cuerpo de cuatro átomos de carbono, tendremos la representación (a) de la figura 1-34, que en el butadieno tendría la de (b) y (c) según hemos visto antes.

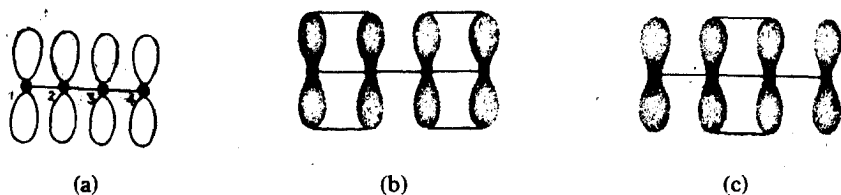


Fig. 1-34.—Orbitales de un cuerpo de cuatro átomos de carbono y formas que tomara en el butadieno.

La representación (b) de la figura anterior nos daría la molécula en la forma representada en la figura 1-35 (a) y (b). Esta última es la representación simplificada de la (a).

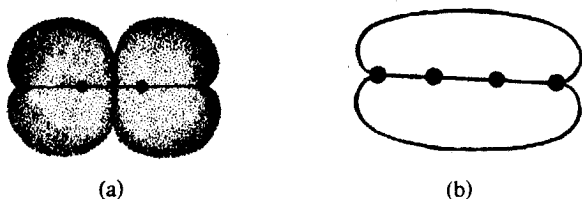


Fig. 1-35.—Orbitales del butadieno de la forma (b) de la fig. 1-34.

La representación (c) de la figura 1-34 nos daría la molécula en la forma representada en la figura 1-34 (a) y (b).

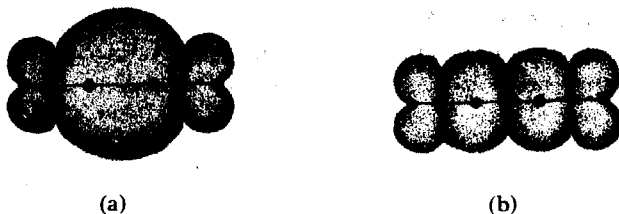


Fig. 1-36.—Orbitales del butadieno cuando tuviese la forma (c) de la fig. 1-34.

Debemos observar que la deslocalización de los enlaces en la teoría de los orbitales moleculares es análoga a la de *resonancia* en la teoría de los enlaces de valencia, según acabamos de ver.

En los enlaces deslocalizados, los electrones tienen más libertad de movimiento que en los localizados, por lo que la energía total del sistema disminuye, es decir, que la deslocalización de los enlaces hace más estable a la molécula. Por eso el butadieno en el estado de la figura 1-33 es más estable que en el (b) de la figura 1-32, en el que los electrones  $\pi$  están apareados como pares aislados comprendiendo cada par dos átomos de carbono.

Ahora bien, el butadieno no está bien representado por (g) ni por (h). Es un híbrido de ambos aunque en su formación contribuyan, como ya dijimos al principio, desigualmente las dos estructuras.

## ENLACE TRIPLE ENTRE ATOMOS DE CARBONO

El enlace triple entre átomos de carbono ( $\text{—C} \equiv \text{C—}$ ) se explicaba antes en la Física clásica por el acoplamiento de seis electrones entre los átomos ( $\text{—C}:::\text{C—}$ ).

La medida de la distancia entre los átomos de carbono en esta unión triple ha dado el valor  $1,20 \text{ \AA}$ , es decir más corta que la unión doble que es, como dijimos antes, de  $1,34 \text{ \AA}$ . Los átomos de carbono al formar el triple enlace se han aproximado aún más pero no tanto como al pasar del enlace sencillo al doble.

La Mecánica cuántica, por analogía con el doble enlace, considera el triple constituido por uno sencillo tipo  $\sigma$  y otros dos situados en planos

perpendiculares, formados por electrones  $\pi$ . Es decir, que una vez formado el orbital  $\sigma$  queda a cada átomo de carbono cuatro orbitales (fig. 1-37).

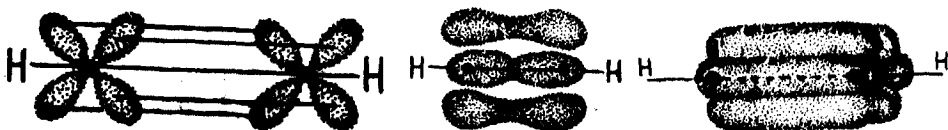


Fig. 1-37.—Superposición de los orbitales  $2p_y$  y  $2p_z$  en los átomos de carbono que forman tres uniones.

Estos orbitales, que son paralelos unos a otros (lo mismo sucede en los dobles enlaces), podrán superponerse para dar lugar a dos enlaces  $\pi$  situados en planos perpendiculares entre sí y a su vez a la línea inter-nuclear.



Fig. 1-38.—Las nubes formadas por orbitales  $\pi$  dan en conjunto una figura casi cilíndrica.

La molécula del acetileno parece, pues, tener una nube electrónica casi cilíndrica (figura 1-37), como se representa en la figura 1-38.

Para la formación de un enlace  $\sigma$  y dos  $\pi$  entre los átomos de carbono han sido necesarios seis electrones.

Igual que sucede en la unión doble, las dos uniones  $\pi$  son fácilmente removibles, y por ello estos cuerpos son muy activos químicamente.

## BENCENO

El análisis y la determinación de su peso molecular dan por fórmula del benceno  $C_6H_6$ . Estudiando este cuerpo espectroscópicamente y por rayos X, se ha demostrado, además, que sus átomos de carbono en la molécula están formando un hexágono regular (ángulos de  $120^\circ$ ), estando los átomos de hidrógeno situados en el mismo plano.

Por su fórmula  $C_6H_6$  se ve no es un hidrocarburo saturado, pues para serlo le faltan ocho átomos de hidrógeno, ya que si lo fuera, su fórmula sería  $C_6H_{14}$ . Cuando se vio tenía muchos menos átomos de hidrógeno, se pensó si tendría enlaces *dobles* o *triples*, pero el estudio de sus propiedades hizo se desistiese de esa idea. En efecto, si sobre él se hace actuar un halógeno, lejos de dar un producto de adición, como correspondería a la rotura de enlaces dobles o triples, se vio daba un compuesto de sustitución, como si fuera un compuesto saturado. Por otra parte



no se ha podido preparar más que un solo derivado monosustituido del benceno, lo cual indica que todos los átomos de hidrógeno tienen una idéntica posición en la molécula, o que cada átomo de hidrógeno está unido a un solo carbono.

La determinación de la energía de los enlaces de hidrógeno, si se supusiera tuviese tres dobles enlaces, sería de  $28,3 \times 3 = 86,4$  Kcal/mol, pero determinado este calor experimentalmente se vio era sólo de 30,6 Kcal/mol. Habría, pues, que rechazar esa hipótesis. Por otra parte, la poca reactividad del benceno, rechazaba la idea de que tuviese esos dobles enlaces.

La forma hexagonal fue también confirmada experimentalmente sometiendo el benceno a la hidrogenación, pues como producto resultante se encontró el *ciclohexano* ( $C_6H_{12}$ ).

Todos los anteriores hechos llevaron a *Kekulé* a admitir para el benceno la forma hexagonal (a) (fig. 1-39), la cual, para una más fácil representación se simplifica en la forma (b). En estas representaciones los átomos de carbono se unen entre sí por valencias sencillas y dobles alternativamente. Se propusieron también otras muchas fórmulas. La figura 1.<sup>a</sup>-p' representa algunas de ellas, pero no fueron aceptadas por la mayor longitud de los enlaces que cruzan la molécula.

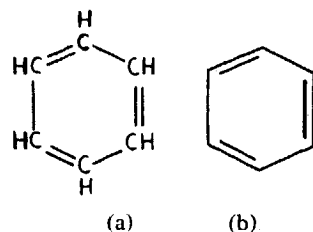


Fig. 1-39.—Formas de representar el benceno sugeridas por Kekulé.

La fórmula (a) (fig. 1-39), aceptada hasta hoy, tiene el inconveniente de que por tener dobles enlaces, hace suponer debería tener las propiedades de un hidrocarburo etilénico y no lo es, pero *Kekulé* explicó esta contradicción suponiendo que la disposición simétrica de los dobles enlaces en la molécula la daba estabilidad y por eso estos dobles enlaces no tenían las propiedades que tendrían si estuviesen aislados. Prueba de

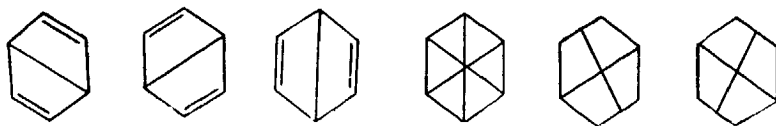


Fig. 1-40.—Distintas fórmulas propuestas para el benceno.

ello, decía, es que si se rompe uno de ellos esa estabilidad desaparece y los otros dos dobles enlaces se rompen con facilidad.

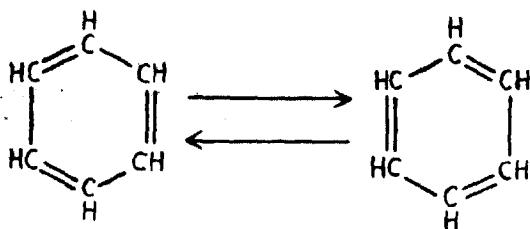


Fig. 1-41.—Fórmulas resonantes del benceno.

Un paso importante se dio al suponer que la fórmula del benceno era *resonante* (híbrida) entre las dos configuraciones de la figura 1-41). En este híbrido las seis ligazones serían todas iguales, pero con características intermedias entre la ligazón

*sencilla* y la *doble*. Las distancias entre los átomos de carbono en el benceno, se han medido por el método de difracción de electrones y se ha encontrado un valor de 1,40 Å, es decir, intermedia (casi la media) entre la unión sencilla (1,54 Å) y la doble (1,33 Å), que es de 143 Å. Es el mismo problema que vimos en el *butadieno*. Esto justifica el carácter intermedio entre la unión simple y la doble. El híbrido resultante tendrá, pues, menor energía que las de las estructuras límites, y por ello es más estable que ellas.

Hoy se explica mejor la estructura del benceno por la teoría de los electrones deslocalizados. Si se supone que los átomos de carbono hacen uso de los mismos orbitales que en el etileno, es decir, que se ha producido una hibridación  $sp^2$ , los seis átomos de carbono y los seis de hidrógeno deberán estar en el mismo plano y un orbital  $sp_z$  en uno perpendicular a éste. La superposición de los orbitales  $sp^2$  conduce al hexágono de seis átomos de carbono, que estarán unidos en el mismo plano por enlaces simples tipo  $\sigma$ . Los seis orbitales  $sp_z$  serán perpendiculares a ese plano y se suponen forman parejas, dando lugar a enlaces  $\pi$  *deslocalizados*. Ahora bien, no hay ninguna razón para que la superposición se haga según la figura (a) o la (b) (fig. 1-42).

Un orbital  $sp_z$  de cualquier átomo se puede superponer de la misma manera con el que está a su derecha que con el que está a su izquierda. Por ello el enlace  $\pi$  se considera formado por la superposición de todos los orbitales  $sp_z$  para dar lugar a un orbital molecular *deslocalizado* (1).

(1) Estos son los que están fusionados a varios núcleos.

Los electrones  $\pi$  no están insertados en el interior de un solo ciclo, sino que pueden desplazarse por toda la capa. Tienen, en este aspecto,

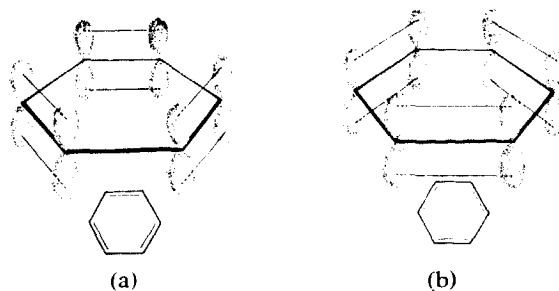


Fig. 1-42.—La representación del benceno...

un comportamiento análogo al de los electrones de los metales. La fórmula resonante entre la (a) y la (b) está representada en la figura 1-42.

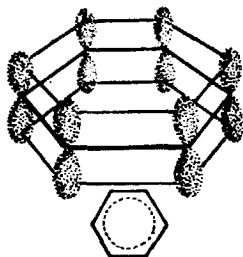


Fig. 1-43.—En realidad la estructura del benceno es un híbrido entre la (a) y (b). Aquí aparecen que la unión de dos átomos de carbono no tienen un enlace y medio.

Al haber hibridado  $sp_2$  tienen que estar los átomos de carbono y los de hidrógeno en el mismo plano. La nube de carga estará, pues, formada por dos flujos que forma anillos por encima y por debajo del hexágono de los átomos de carbono. El compuesto forma como un emparedado (figura 1-44), en el que los átomos de carbono con los enlaces forman el contenido interior del emparedado y las nubes electrónicas de los enlaces  $\pi$  forman las dos rebanadas de pan. Cada átomo de carbono contribuye con la mitad a formar el par electrónico que le enlaza con otro átomo de carbono, lo cual representa un enlace medio.

En la figura 1-43 representa la simplificación de la figura del benceno. El círculo interior del hexágono representa los enlaces. Es ésta una buena representación, pues indica que las uniones no son simples ni dobles, y por ello la energía de estabilización del benceno es menor que la representada por la fórmula de *Kekulé*.

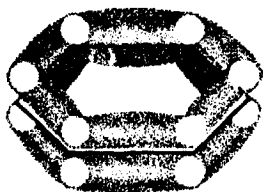


Fig. 1-44.—El benceno no tiene la forma de sebmadero.

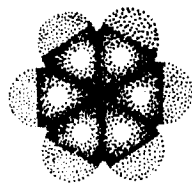


Fig. 1-45.—Estructura que presenta la molécula del benceno

## REPRESENTACION DE LAS MOLECULAS ORGANICAS; MODELOS MOLECULARES

La representación de las moléculas de las sustancias orgánicas por modelos geométricos, es sumamente útil. Sin embargo, presenta la dificultad de que el dibujo de estos modelos, en algunos casos, no es fácil de hacer y de aquí la resistencia que ha encontrado su uso entre los químicos.

Este problema que se presenta ahora con insistencia, no es ningún concepto nuevo. En la época de los *alquimistas* explicaban el sabor *dulce* o *amargo* de ciertas sustancias suponiendo a estas últimas puntiagudas y dentadas, mientras que las dulces las suponían lisas y redondeadas. Las sustancias *ácidas* las consideraban como agudas y puntiagudas. Esta forma angular o de aguja la consideraban como característica de las sustancias ácidas y la mayor o menor avidez con la que atacaban a las sustancias, creían era debido al grado de agudeza de los puntos o esquinas de sus partículas. Por el contrario, a los álcalis les consideraban formados por partículas de tal naturaleza que permitían se introdujesen entre ellas los ácidos y las disolviesen. *Brow* dedujo de estas consideraciones que la forma como se combinaban los cuerpos se debía a la forma de sus átomos.

*Mitscherlich* descubrió el *isomorfismo* y relacionó la constitución de los cuerpos con su forma cristalina, siendo ésta la primera conexión en-

tre la geometría molecular o arquitectura y la acción química de las sustancias. Sustancias compuestas que tienen semejante constitución química, no sólo poseían la misma forma cristalina (medida por los ángulos), sino que en muchos casos poseían el mismo número de moléculas de agua de cristalización.

Los experimentos seguidos durante estos últimos años en relación con los radios atómicos e iónicos ha hecho que sean más precisos los conocimientos que se tienen sobre *isomorfismo*. El estereo-isomerismo juega un importante papel en las teorías sobre Química Orgánica. Las primeras observaciones fueron hechas por *Van't Hoff* y *Le Bell*. Las formas isoméricas tienen una profunda significación en muchos problemas de reactividad química. Recordemos la diferente reactividad del butano normal y del isobutano o entre los isómeros orto, meta y para los derivados disustituidos del benceno. Las diferencias se han visto son consecuencia de la geometría molecular.

Se han adquirido grandes conocimientos sobre estructura molecular con estudios hechos con rayos X, espectro infrarrojo, momentos dipolares, etc., etc. Estas investigaciones han dado datos importantísimos sobre la forma y configuración espacial de las moléculas. No sólo se ha determinado la longitud de los enlaces, sino también se ha llegado a precisar la posición relativa de los átomos en la molécula, o sea la geometría de las mismas. Se ha llegado a encontrar una relación entre el número de átomos ligados a uno determinado y la configuración de la molécula o ión. La constitución tetraédrica de algunas moléculas se demostró por estos procedimientos.

Las moléculas triatómicas pueden ser o no lineales, las tetraédricas son planas o piramidales. Se han determinado cuantitativamente los diámetros de los átomos en las moléculas y las distancias de unión de esos átomos. Todos estos datos han hecho posible una mayor aproximación a la geometría molecular. La importancia de esta geometría, en las reacciones catalíticas fue vista en 5.º curso.

Los modelos moleculares se presentan hoy uniendo esferas, que representan átomos, por alambres, que representan valencias. Tienen estos modelos la ventaja de poder formarse una idea de la estructura de la molécula en el espacio, pero tienen el inconveniente de dar una idea falsa de sus magnitudes. Veamos algunos ejemplos:

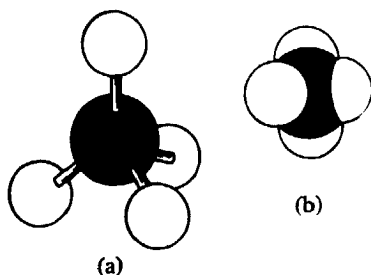


Fig. 1-46.—Modelos que la molécula del metano.

*Metano:* Su estructura se presenta de dos maneras (fig. 1-46 (a) y (b)). En la (b) no se ve bien cómo están unidos los átomos de hidrógeno al átomo de carbono. Para ver esto se utiliza la (a) en la que las bolas representan los puntos medios de los átomos y se ve bien en ella las uniones de estos y los ángulos que forman. Tienen, sin embargo, el inconveniente de que dan la impresión de que

los átomos están en reposo cuando en realidad están en oscilación, y también en el caso de la (a), de dar la impresión de que éstos están muy alejados unos de otros. En toda la Química Orgánica, pero especialmente en la lección 3.<sup>a</sup>, tendremos ocasión de ver la utilidad de estas representaciones.

Veamos ahora algunos casos sencillos (fig. 1-46).

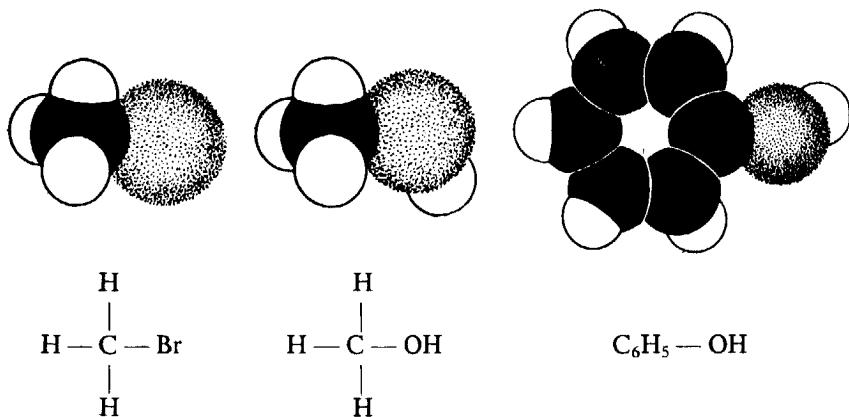


Fig. 1-47.—Representación de algunos conjuntos.

Por los métodos de difracción de rayos X y de electrones se ha llegado a fijar un diagrama electrónico para el naftaleno, que representa la

figura 1-48. En ella se representa la distribución de los electrones que rodean a los núcleos. Las líneas de puntos representan líneas de la misma densidad electrónica. Una vez determinados estos diagramas electrónicos se pueden ya hacer representaciones geométricas, pues se conocen las magnitudes de los ángulos de enlace, de los radios covalentes y hasta de los radios de Van der Waals.

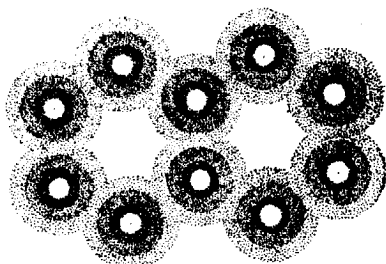


Fig. 1-48.—Diagrama electrónico del maftaleno, sacado por el método de difracción.

Como un ejemplo de hasta dónde se ha llegado en el estudio de la arquitectura de las moléculas citaré el caso bien significativo de la molécula de la ftalocianina (1) (fig. 1-49).

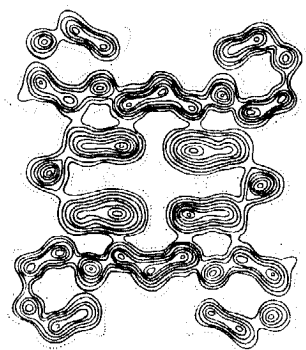


Fig. 1-49.—Densidad electrónica de la molécula de la ftalocianina.

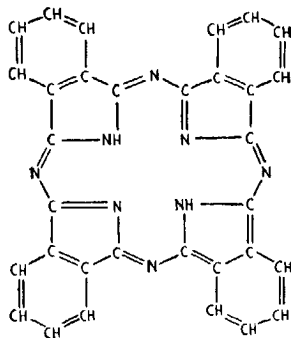


Fig. 1-49.—Fórmula original de la ftalocianina como resultado de las anteriores fórmulas.

(1) Cito este caso no para que sea estudiado por los alumnos, sino como ejemplo bien característico de hasta donde se ha podido llegar con estos estudios de electrones.

# CUADERNOS DIDACTICOS

## EXPERIENCIAS DE FISICA Y QUIMICA

Ptas.

<p><b>CUADERNO NUM. 6:</b> <i>Demostración sencilla de las ondas eléctricas</i>, por Carlos López Bustos; <i>Observaciones sobre la unidad didáctica</i>, por Cándida Uriel; <i>Consideraciones didácticas acerca de la aplicación de la fórmula <math>F = M \cdot a</math></i>, por Manuel Zúñiga Solano; <i>Una aplicación didáctica del oscilógrafo</i>, por Enrique Sanz Jarauta; <i>Un ensayo de radio escolar</i>, por Antonio Valenciano Garro; <i>Estudio comparativo de las viscosidades en el aceite pesado, aceite medio, aceite ligero SAE 30 y SAE 60</i>, por María Alonso Ruiz; <i>Norma general práctica para la deducción de la "fórmula electrónica" de los elementos químicos</i>, por Francisco Molina Múgica; <i>Las dos caras de la ciencia</i>, por Guillermo D. Mur; <i>Consideraciones acerca del movimiento de un proyectil en el vacío</i>, por José Esteve Pastor; <i>La enseñanza de la Física y de la Química en el Bachillerato</i>, por Andrés León Maroto; <i>La normalización de las definiciones en Física</i>, por León Garzón Ruipérez; <i>Memoria de las Reuniones de estudio de Catedráticos de Física y Química: Visitas y conferencias.</i></p>	24
<p><b>CUADERNO NUM. 7:</b> <i>Una concepción moderna de la enseñanza de la Física: Informe de la O. E. C. D. Métodos. Trabajos prácticos. Exámenes. Reclutamiento de los Profesores. Manuales y medios auxiliares; Circuito de corriente alterna con resistencia y autoinducción</i>, por C. López Bustos. (Agotado.)</p>	
<p><b>CUADERNO NUM. 8:</b> <i>Optica paraxial</i>, por Justiniano Casas, Catedrático de la Universidad de Zaragoza</p>	10
<p><b>CUADERNO NUM. 9:</b> <i>Estudio experimental de la distorsión</i>, por C. López Bustos; <i>Comprobación de la ley Coulomb</i>, por A. F.; <i>Estudio experimental del movimiento en el Bachillerato Elemental</i>, por A. Valenciano Garro; <i>Cuadro de unidades mecánicas para un formulario</i>, por José Jiménez Sarrión; <i>Las escalas de masas atómicas</i>, por Serafín Pazó Carracedo; <i>Observaciones visual y auditiva de los fenómenos radiactivos</i>, por Marcelino Pardo Casas y José Antonio Pardo Martínez; <i>La clase de Física y Química en la Enseñanza Media</i>, por María Bouzo Santiago</p>	8
<p><b>CUADERNO NUM. 10:</b> <i>Oscilaciones eléctricas</i>, por León Garzón Ruipérez; <i>Aplicación elemental de las telas metálicas</i>, por Martín Santos Romero</p>	4
<p><b>CUADERNO NUM. 11:</b> <i>Experiencias con la cubeta de olas</i>, por Enrique Sanz Jarauta y J. Félix Goiburu; <i>Medidas de longitudes de ondas con red de difracción</i>, por J. Félix Goiburu; <i>Experiencias de Electricidad: 1) Corrientes alternas y continuas. 2) Freno eléctrico. 3) Fenómenos de autoinducción y transformadores</i>, por Carlos López Bustos; <i>Experiencias de catálisis</i>, por M. Zúñiga; <i>Movimientos de traslación y movimiento de rotación</i>, por Demetrio Iglesias Vacas</p>	10
<p><b>CUADERNO NUM. 12:</b> <i>Modificación de la teoría de Lewis-Laqmuir sobre la regla de Octete propuestas por S. W. Linnet</i>, por Andrés León Maroto; <i>Prácticas de Física y Química (Cursillo de Santiago de Compostela) 19 prácticas desarrolladas</i></p>	20
<p><b>PUBLICACIONES DE LA DIRECCION GENERAL DE ENSEÑANZA MEDIA</b>  Atocha, 81, 2.º <span style="float: right;">MADRID (12)</span></p>	