

Efecto Inductivo y efecto de Resonancia



www.youtube.com



Desplazamientos electrónicos

Efecto inductivo

“Desplazamiento parcial del par electrónico en enlace sencillo “ σ ” hacia el átomo más electronegativo provocando fracciones de carga”.

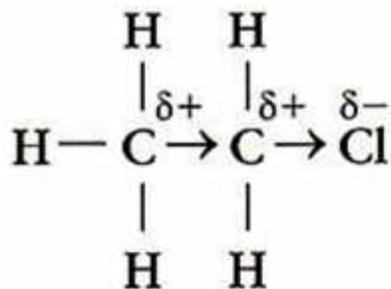
Efecto mesómero o resonancia

“Desplazamiento del par de electrones “ π ” del doble enlace hacia uno de los átomos por la presencia de pares electrónicos cercanos”.



Efecto inductivo

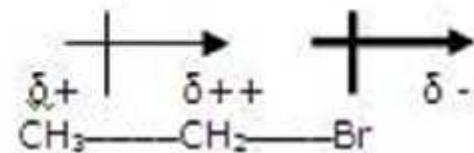
Se conoce como efecto inductivo, aquel desplazamiento del par electrónico del enlace covalente hacia el átomo más electronegativo, lo que, a su vez, produce una distorsión de los enlaces vecinos



Consideremos, en primer lugar, un caso sencillo: la molécula de cloroetano, $\text{CH}_3\text{CH}_2-\text{Cl}$. Al ser el átomo de Cl más electronegativo que el átomo de C, el par electrónico del enlace se desplazará hacia el Cl, quedando el átomo de C con una “deficiencia electrónica”, es decir, con carga parcial positiva, $\delta+$.

<https://www.youtube.com/watch?v=1B2dSOwkJaE>





El hidrógeno se toma como referencia
(no provoca efecto inductivo)

Existen grupos atractores, que los denominamos grupos (-I) y son aquellos que retiran electrones

Ejemplos: $-\text{NO}_2$, $-\text{COOH}$, $-\text{X}$ (halógeno), $-\text{OH}$...

Y existen grupos dadores, que los denominaremos (+I) y son aquellos que aportan electrones

Ejemplos:

$-\text{CH}_3$, $-\text{CH}_2-\text{CH}_3$, $-\text{C}(\text{CH}_3)_3$, $-\text{COO}^-$ etc....

Se transmite a lo largo de la cadena a enlaces adyacentes, aunque cada vez más débilmente.



El efecto inductivo se propaga a través de la cadena sólo hasta el tercer átomo de C.

Aquellos átomos o grupos de átomos que atraen hacia ellos a los electrones compartidos con el C ejercen **efecto inductivo negativo, $-I$** . Y a la inversa, ciertos átomos o grupos de átomos unidos al C presentan el efecto contrario, es decir, tienden a cederlos, ejerciendo, por tanto, un **efecto inductivo positivo, $+I$** . Se considera que el efecto inductivo del átomo H es despreciable.

Efecto	Especie química sustituyente					
$-I$	$-\text{NO}_2$	$-\text{C}\equiv\text{N}$	$-\text{COOH}$	$-\text{X}$	$-\text{OCH}_3$	$-\text{OH}$
$+I$	$-\text{O}^-$	$-\text{COO}^-$	$-\text{C}(\text{CH}_3)$	$-\text{C}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$





La teoría vitalista

- La Química Orgánica se suscribe a la teoría de “el vitalismo” hasta principios del siglo XIX



Grasa animal + NaOH/H₂O → jabón + glicerina
Jabón + H₃O⁺ → ácidos grasos

1816, Michael Chevreul



$\text{NH}_4^+ \text{ } ^-\text{OCN} \xrightarrow{\text{calor}} \text{H}_2\text{N-CO-NH}_2$
cianato amónico urea

1828, Friedrich Wöhler



Síntesis del colorante púrpura: mauveína

1856, William Henry Perkin

Sus descubrimientos rebaten la teoría vitalista

La teoría estructural



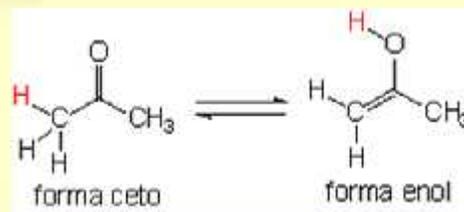
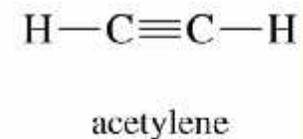
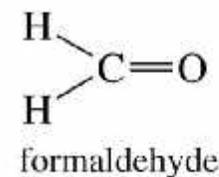
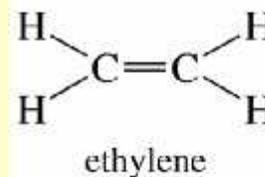
Introduce el concepto de valencia

1852, Edward Frankland

Los pioneros de la teoría estructural.



•CH ₃ CH ₃	•CH ₃ CH ₂ Cl	•CH ₃ COOH
•etano	•cloruro de etilo	•ácido acético

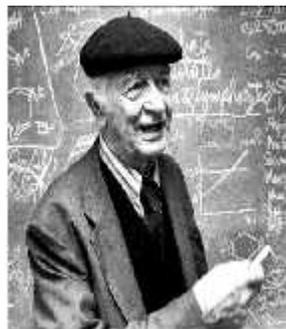


Alexander Mijailovich Butlerov

Estudia el fenómeno de la tautomería

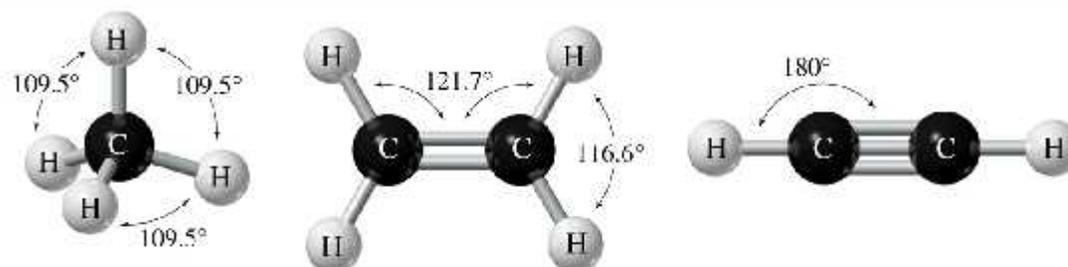
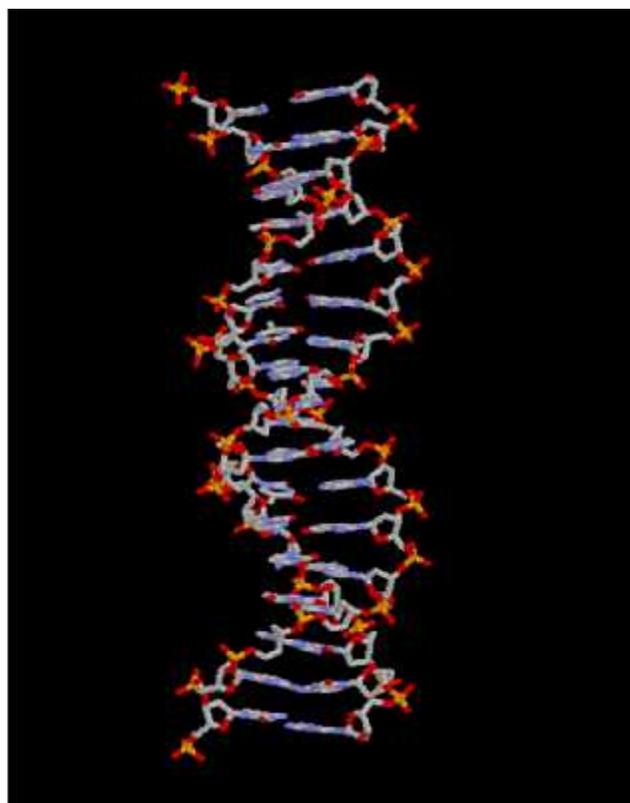


La teoría de la resonancia y la química orgánica actual



Linus Pauling, Ingold, Robinson y Arndt

Desarrollan la teoría de la resonancia durante el siglo XX basándose en la aplicación de la mecánica cuántica



Compuestos orgánicos: Desde los hidrocarburos más simples hasta las cadenas de ADN

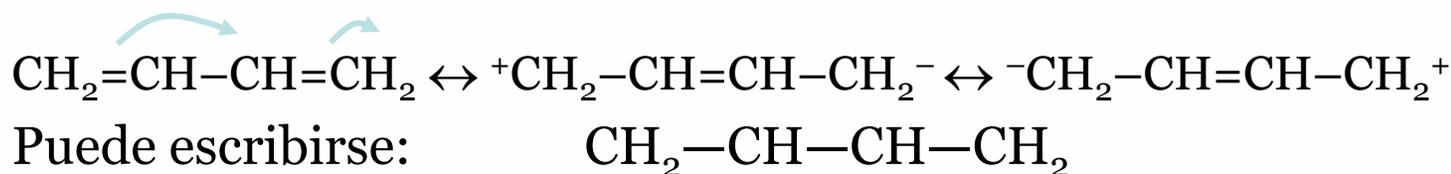
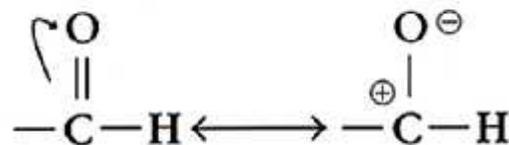
Efecto mesómero o Resonancia



Se produce cuando hay enlace múltiples y la posibilidad de que los e^- se deslocalicen (átomo electronegativo con posibilidad de tener parejas de e^- sin compartir).

El proceso se representa mediante estructuras mesómeras o resonantes, donde una flecha indica el desplazamiento electrónico.

Ejemplos



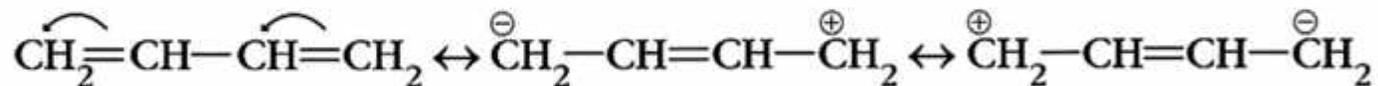
El desplazamiento electrónico se va a producir siempre que existan algunas condiciones

Enlaces múltiples alternados (conjugados) en una molécula.
Ejemplos: 1,3-butadieno y benceno



La fórmula de este compuesto no justifica el hecho experimental de que los enlaces C – C tengan longitudes intermedias entre la correspondiente a un enlace sencillo y a uno doble

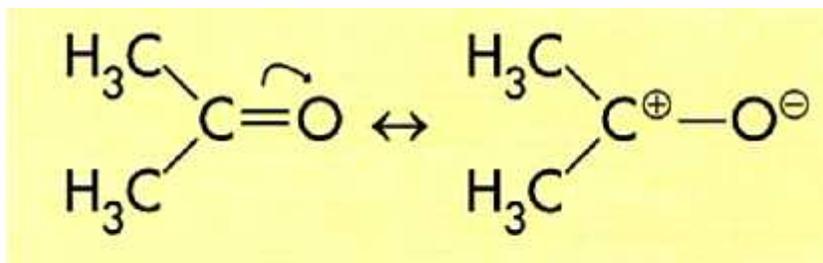
El efecto de resonancia es el que puede explicar este hecho, mediante las siguientes estructuras



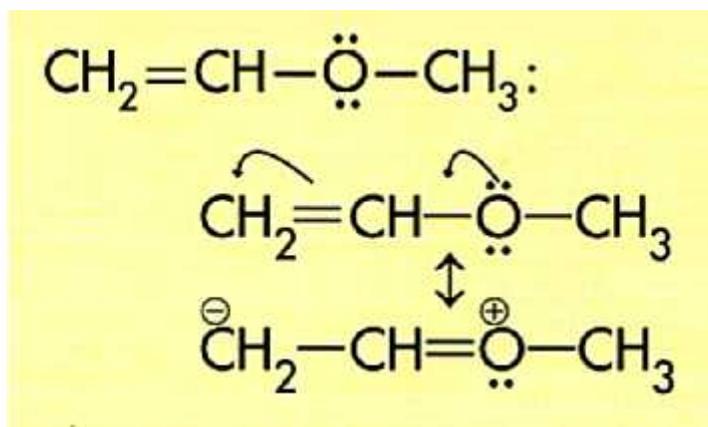
El butadieno real sería: $\text{CH}_2 \equiv \text{CH} \equiv \text{CH} \equiv \text{CH}_2$



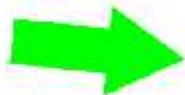
Un enlace múltiple (doble o triple) entre dos átomos de diferente electronegatividad. Por ejemplo, en la acetona



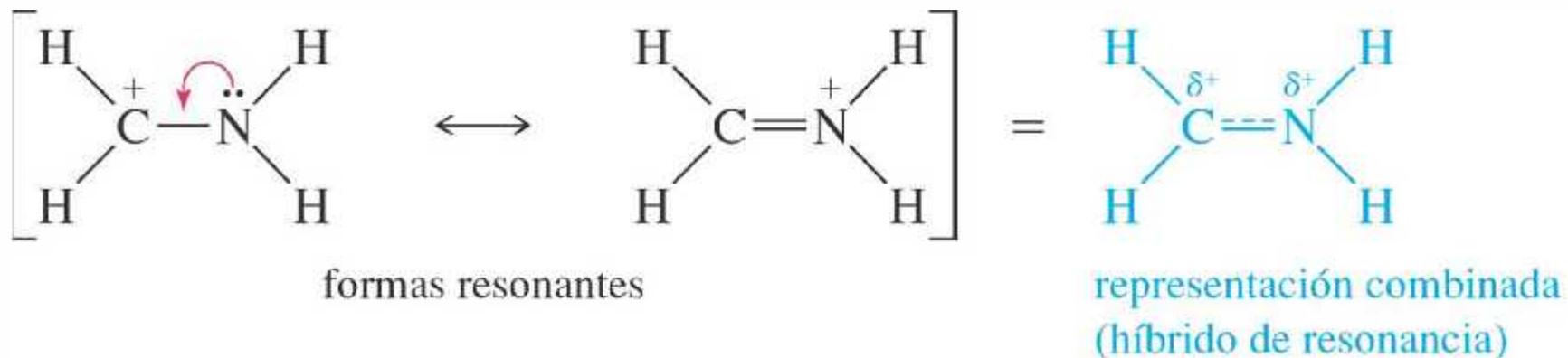
Pares de electrones no enlazantes en un átomo unido a otro que soporta un doble o un triple enlace. Por ejemplo, el metilviniléter



Reglas de resonancia



Las estructuras resonantes sólo suponen movimiento de electrones (no de átomos) desde posiciones adyacentes





Las estructuras resonantes en la que todos los átomos del 2^o período poseen octetes completos son más importantes (contribuyen más al híbrido de resonancia) que las estructuras que tienen los octetes.

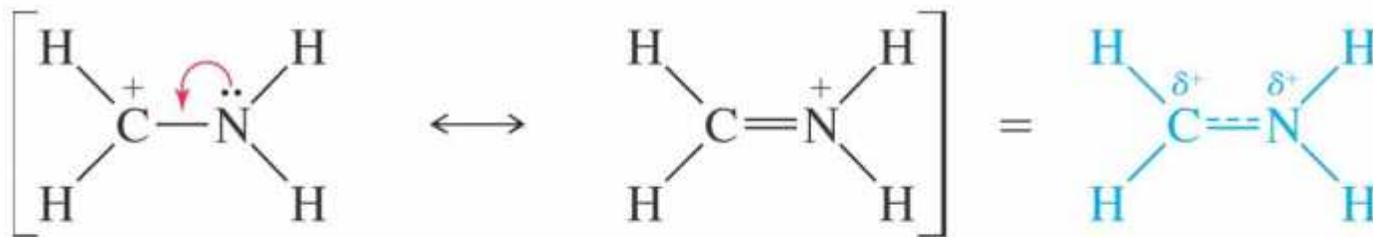


Las estructuras más importantes son aquellas que supongan la mínima separación de carga.



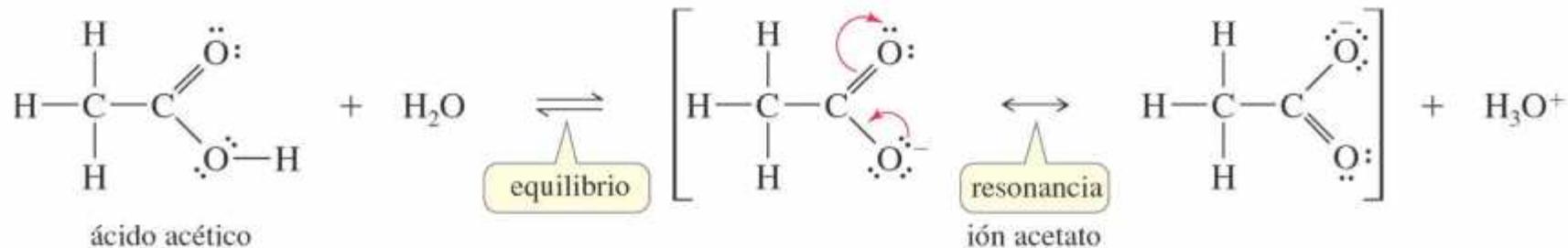
En los casos en que una estructura de Lewis con octetes completos no pueda representarse sin separación de cargas, la estructura más importante será aquella en la que la carga negativa se sitúa sobre el átomo más electronegativo y la carga positiva en el más electropositivo.





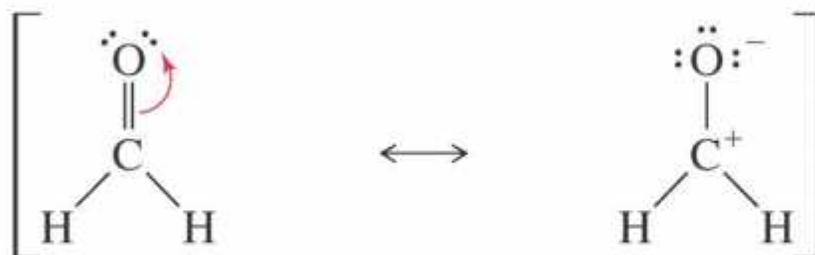
formas resonantes

representación combinada
(híbrido de resonancia)



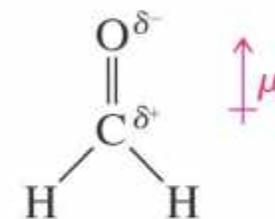
ácido acético

ión acetato



todos los átomos con octetos
completos, no hay separación de cargas
(contribuyente mayor)

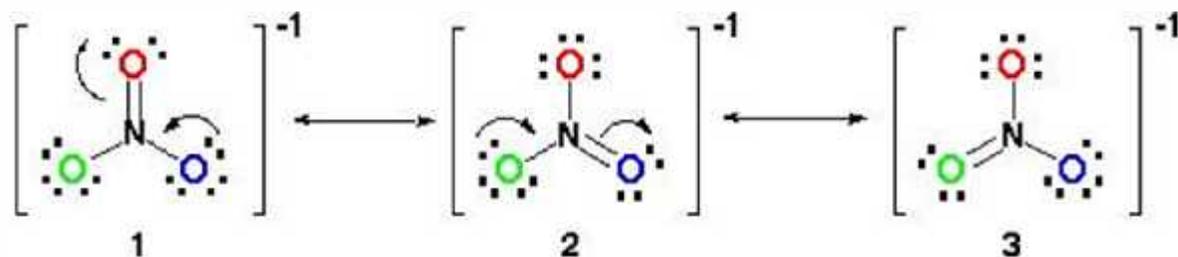
carbono sin octeto completo,
separación de cargas
(contribuyente menor)



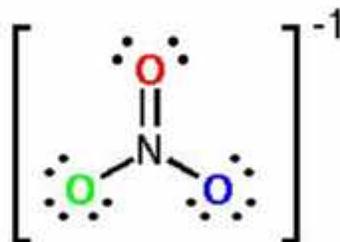
momento dipolar



No siempre existe una única estructura de Lewis que pueda explicar las propiedades de una molécula o ión.



A cada una de ellas se le denomina forma resonante y al conjunto híbrido de resonancia



Condiciones para escribir formas resonantes

➔ Para pasar de una forma resonante a otra solamente puedo mover electrones, nunca átomos.

➔ Todas las estructuras resonantes que yo escriba deben ser estructuras de Lewis válidas.

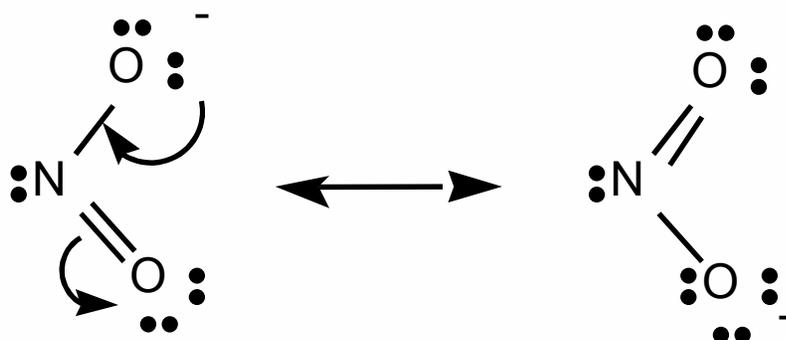
➔ Las estructuras resonantes deben poseer el mismo número de electrones desapareados.

➔ Las estructuras resonantes más importantes son las de menor energía potencial.

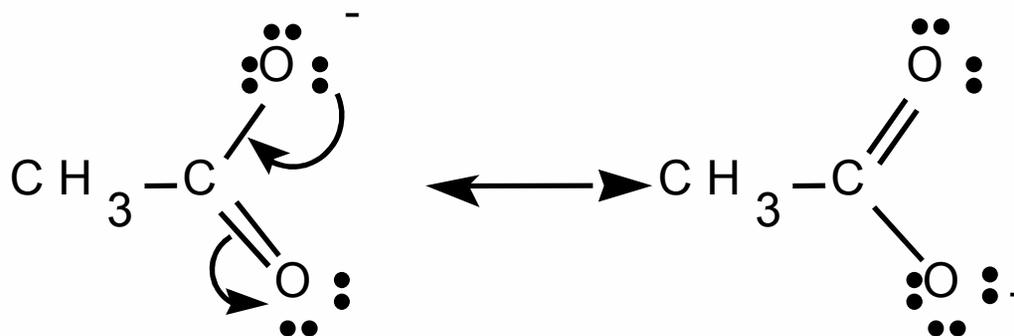


Ejemplos

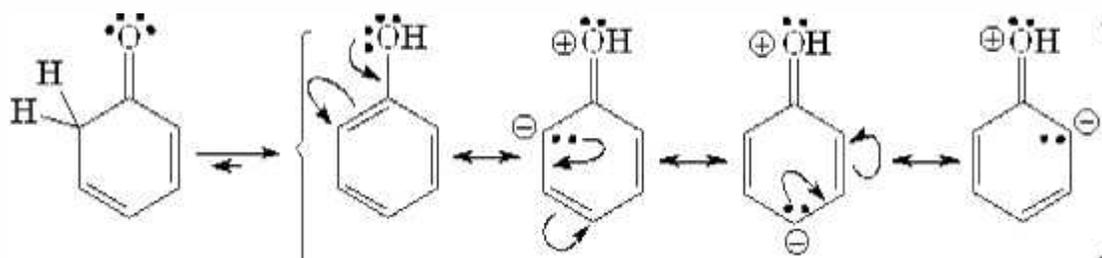
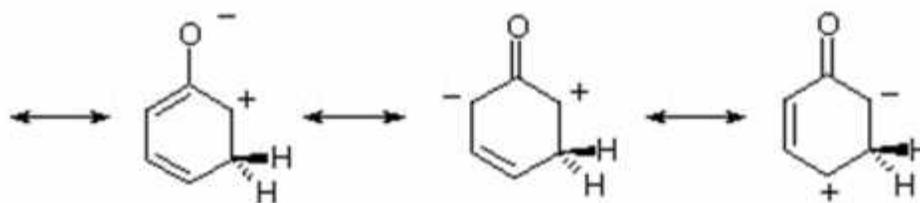
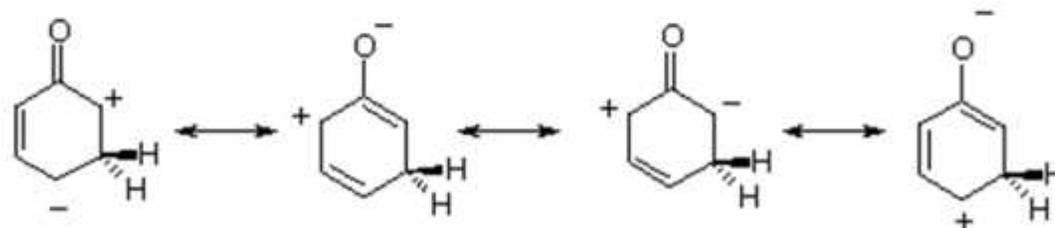
Ión Nitrito



Ión Etanoato



Ejemplos



Tips importantes

- **Flechas curvadas:** un símbolo utilizado para mostrar la redistribución de los electrones de valencia.
- Usando flechas curvadas, hay sólo dos tipos de distribución de electrones:
 - Desde un enlace a un átomo adyacente
 - Desde un átomo a un enlace adyacente
- Todas las estructuras contribuyentes deben ser aceptadas.
- No hay más de dos electrones en cada orbital. No hay más de 8 electrones de valencia en el segundo período.

