

2. Gaia: Lotura Kimikoa Konposatu organikoetan

1.- Mekanika kuantikoak emandako deskribapena.

1.1.- Orbitalen arteko gainezarmena: σ eta π loturak.

1.2.- Karbonoen arteko loturak: Hibridazioa

1.2.1.- Metanoaren eta etanoaren egitura

1.2.2.- Etenoaren egitura

1.2.3.- Etinoaren egitura

1.2.- Beste funtzio-taldeen egitura.

1.3.- Zenbait molekulen egitura.

2- Lotura lekutua.

2.1.- Lotura polar eta apolarrak

2.1.- Efektu induktiboa

3.- Lotura deslekutua

3.1.- Lotura desleketuaren deskribapena: Bentzenoa

3.2.- Erretsonantzia-egiturak eta erretsonantzia-hibridoa.

3.2.1.- Erretsonantzia-arauak.

3.2.2.- Egitura erretsonanteen egonkortasun erlatiboa

3.3.- Zenbait konposaturen egitura erretsonante.

3.4.- Efektu mesomeroa

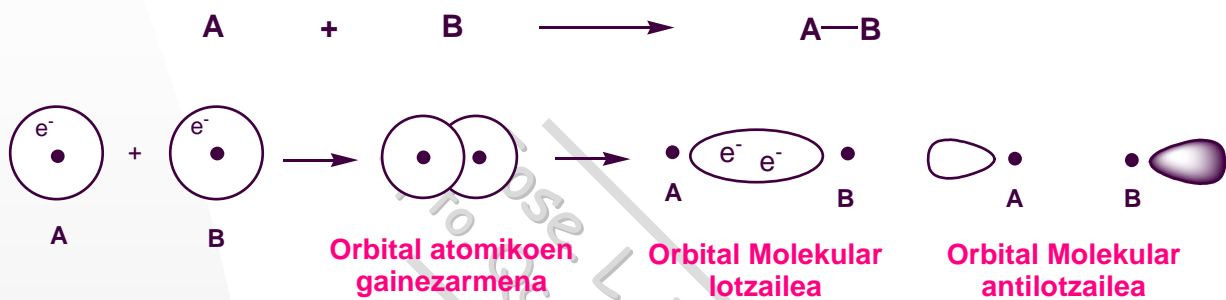
4.- Molekulen arteko indarrak

2. Gaia: Lotura kimikoa konposatu organikoetan

- Mek. kuantikoak emandako deskribapena:

Orbital molekularrak:

Lotura kobalenteak bi orbital atomikoen arteko ginezarmenaren ondorioz sortzen dira

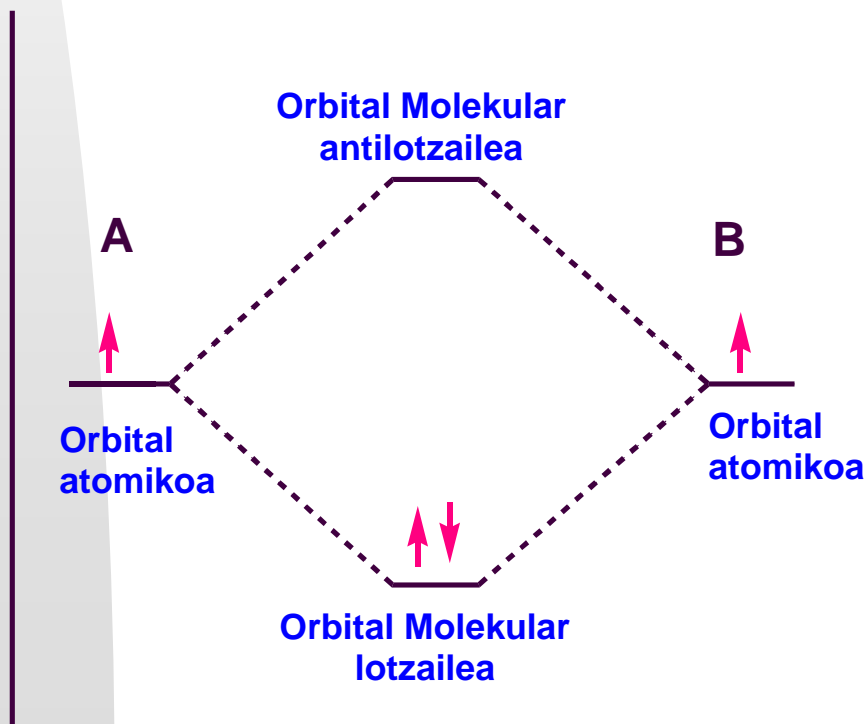


Bi orbital atomikoetatik

Bi orbital molekular

O.M. Lotzailea

O.M. Antilotzailea



2. Gaia: Orbital molekularrak

Gainezarmena zenbat
eta eraginkorragoa
izan



Orduan eta
Lotura
sendoagoa

→ O.A.-en tamaina:

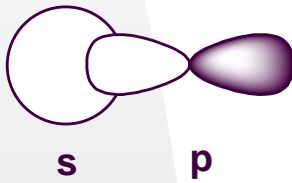
$$s + s > p + p$$

→ O.A.-en energia:

$$2s + 2p > 1s + 3p$$

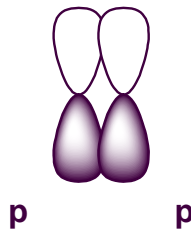
Gainezarmenaren geometria:

→ Frontala: Nukleoen arteko ardatzaren arabera



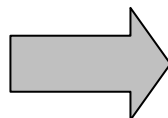
σ lotura

→ Lateral: Nukleoen arteko ardatzarekiko plano perpendikulararen arabera



π lotura

Gainezarmen frontala
eraginkorragoa da

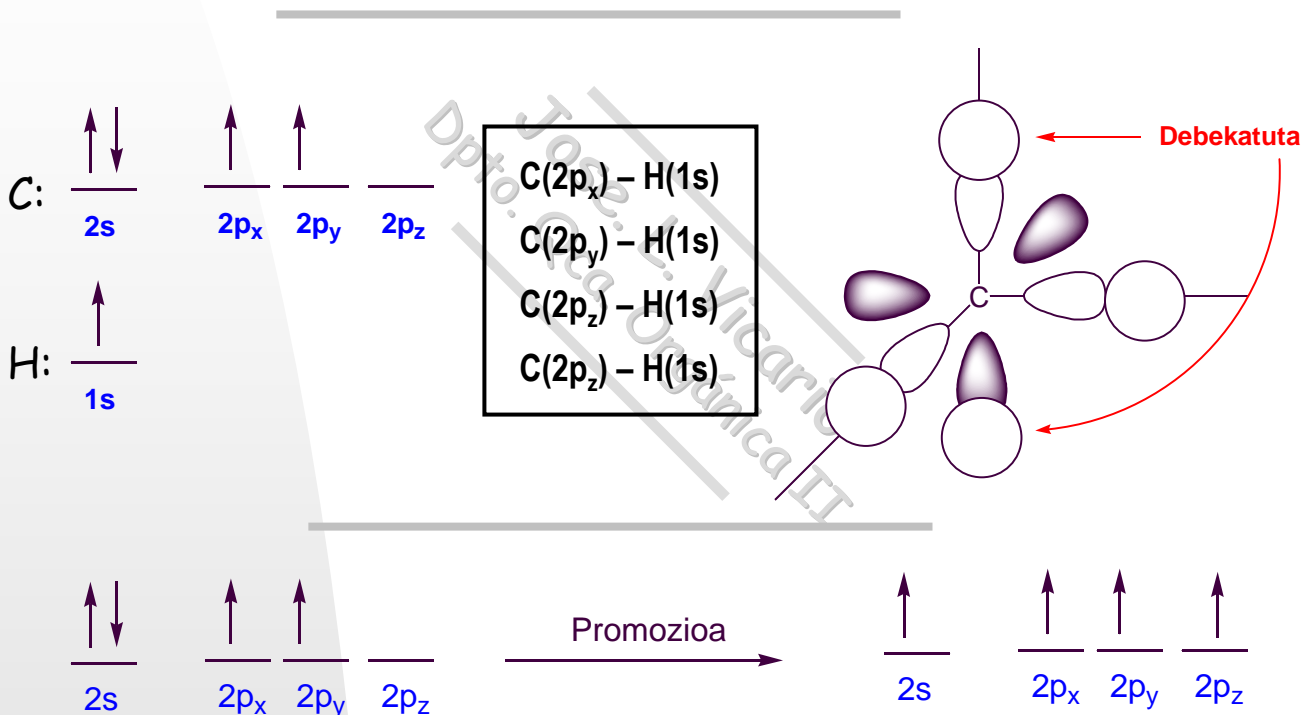
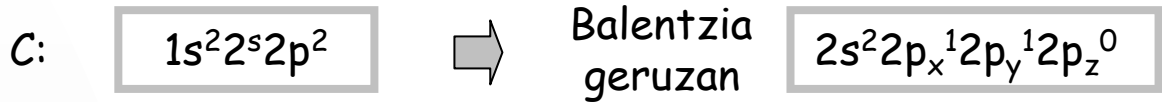


σ lotura π lotura
baino sendoagoa da

2. Gaia: Lotura kimikoa konposatu organikoetan

Karbonoen arteko loturak

Metanoaren egitura



C(2s) - H(1s) \rightarrow Lotura desberdina, bestak baino sendoagoa

C(2p_x) - H(1s)

C(2p_y) - H(1s)

C(2p_z) - H(1s)

Esperimentalki:

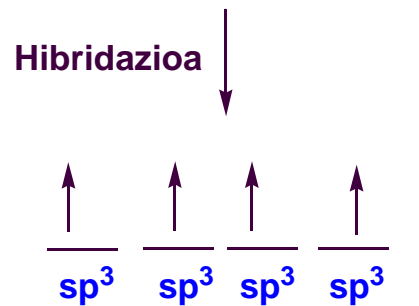
Metanoaren C-H lotura guztiak berdinak dira

2. Gaia: Metanoaren egitura

Hibridazioaren kontzeptua

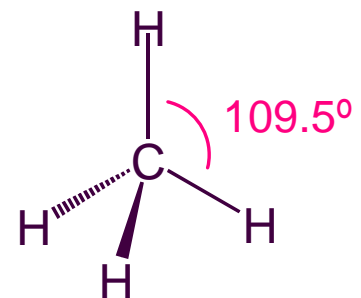
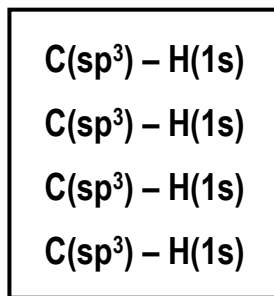
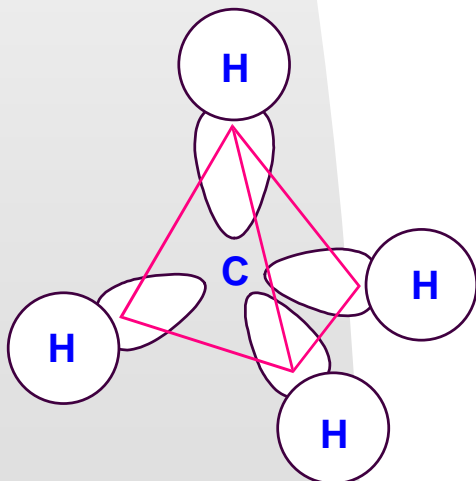


Karbonoen balentzia-orbitalak berrantolatzen dira, loturak eratu aurretik. Karbonoaren 2s orbitala eta hiru 2p orbitalak elkarrekin nahasten dira sp^3 izeneko lau orbital hibrido emateko.



sp^3 orbital hibridoek

- **Itxura:** Lobularra
- **Geometria:** Tetraedrikoa (e^- -en arteko aldarapen indarrak gutxitzeko)



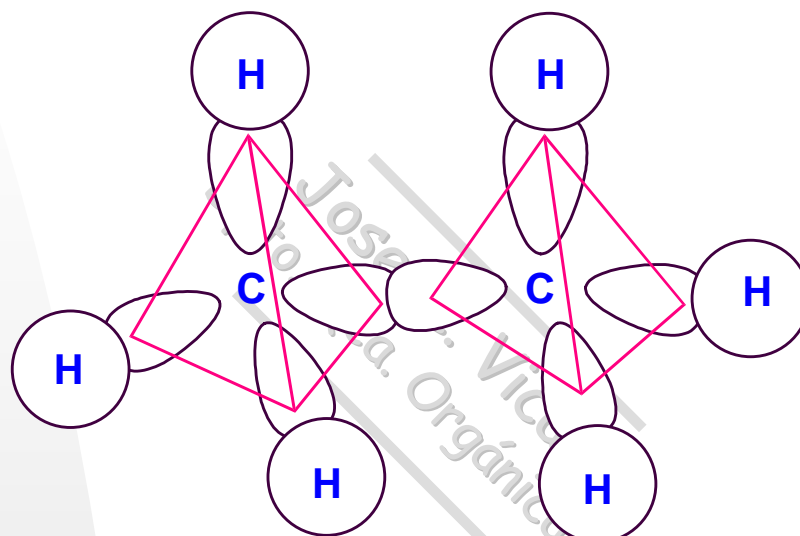
Orbitalen arteko gainezarmen frontala: →

C-H σ loturak

2. Gaia: Metanoaren egitura

Etanoaren egitura

Karbono batek, sp^3 orbital hibrido bat erabil dezake beste karbono batekin (sp^3 hibridazioan) lotzeko. Beste sp^3 orbital hibridoak hidrogenoen 1s orbitalekin C-H loturak eratzeko erabil ditzake



C-C lotura bakunaren inguruko biraketa askea da. Antolamendu hirudimentsional desberdinak sortuz. (**konformazioak**)



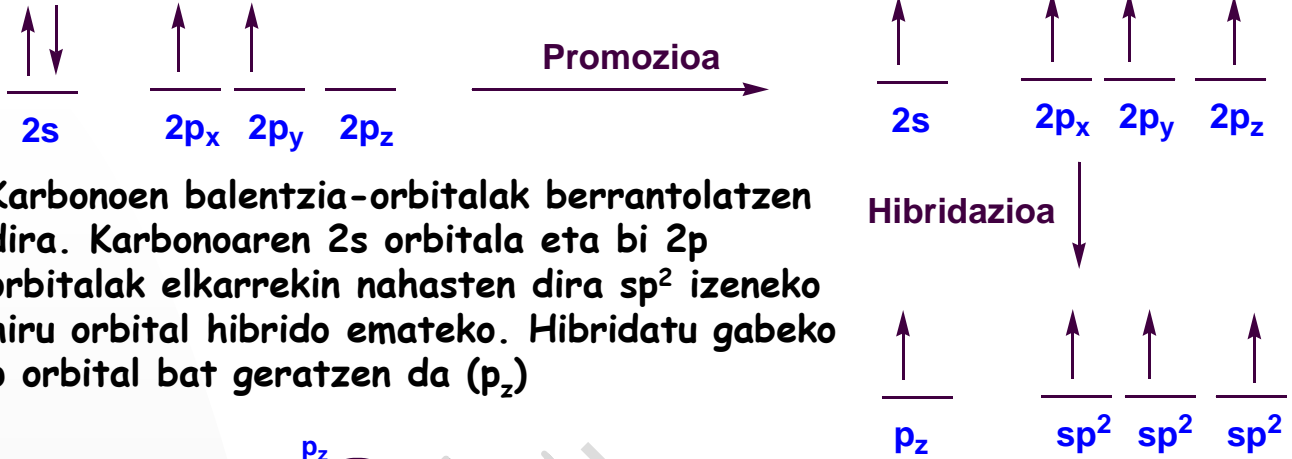
Konposatu organikoetan karbonoak geometria tetraedrikoa hartzen du



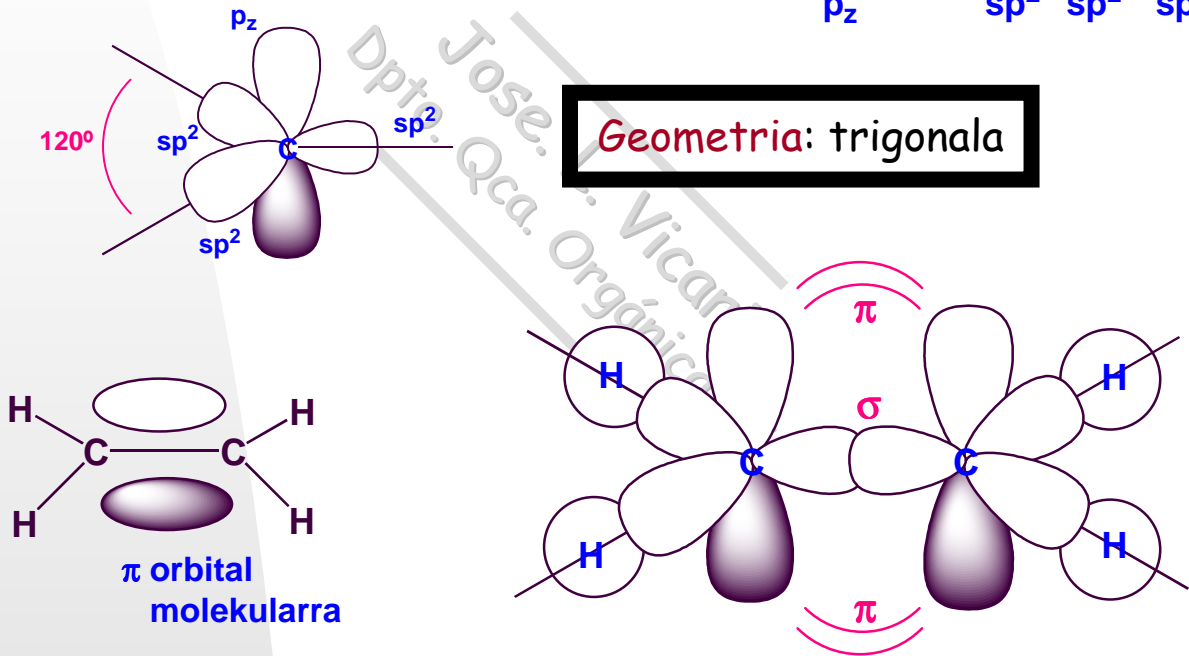
Konposatu organikoek bolumena daukate

2. Gaia: Lotura kimikoa konposatu organikoetan

Etenoaren egitura

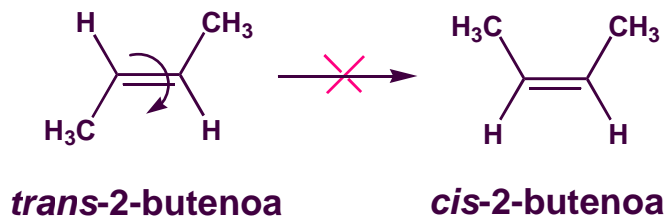


Karbonoen balentzia-orbitalak berrantolatzen dira. Karbonoaren 2s orbitala eta bi 2p orbitalak elkarrekin nahasten dira sp^2 izeneko hiru orbital hibrido emateko. Hibridatu gabeko p orbital bat geratzen da (p_z)



$C=C$ lotura bikoitza ($\sigma + \pi$) $C-C$ lotura bakuna baino **laburragoa** da (1.54\AA vs 1.34\AA) eta berez **sendoagoa** (79 vs 143 kcal/mol).

$C-C$ lotura bikoitzaren inguruko biraketa debekatuta
(**isomero geometrikoak**)



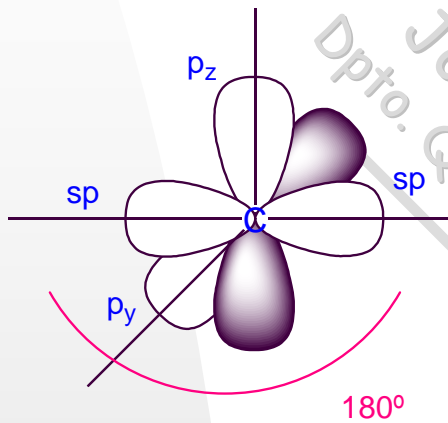
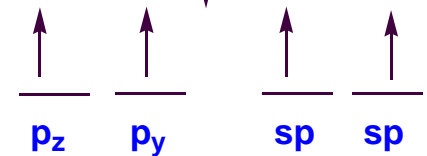
2. Gaia: Lotura kimikoa konposatu organikoetan

Etinoaren egitura

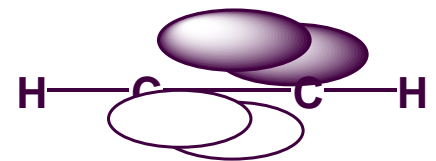
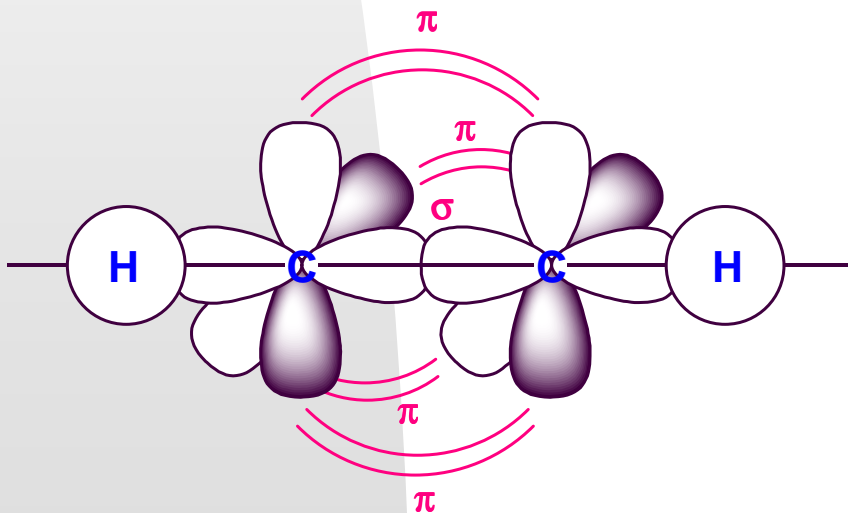


Karbonoen balentzia-orbitalak berrantolatzen dira. Karbonoaren $2s$ orbitala eta $2p$ orbital bat elkarrekin nahasten dira sp izeneko bi orbital hibrido emateko. Hibridatu gabeko bi p orbital geratzen dira (p_z eta p_y)

Hibridazioa



Geometria: lineala



$C=C$ lotura hirukoitza ($\sigma + 2\pi$) $C-C$ lotura bikoitza baino laburragoa da eta berez **sendoagoa**

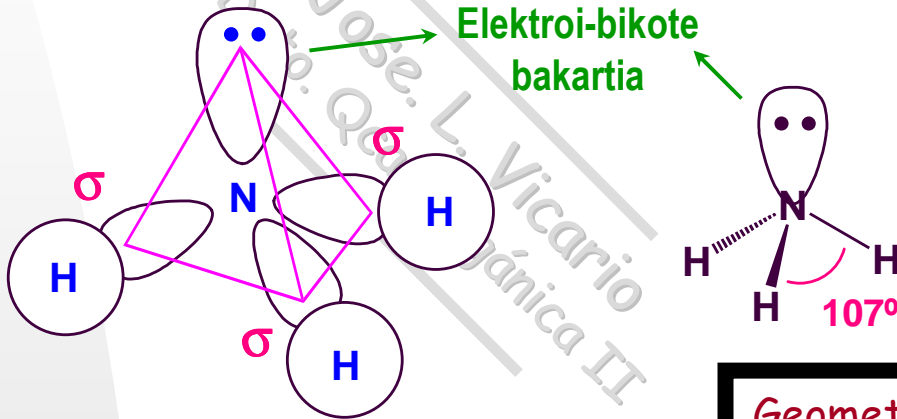
2. Gaia: Lotura kimikoa konposatu organikoetan

Beste funtzio-taldeen egitura

Amoniakoa eta aminak

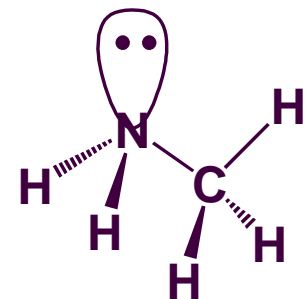
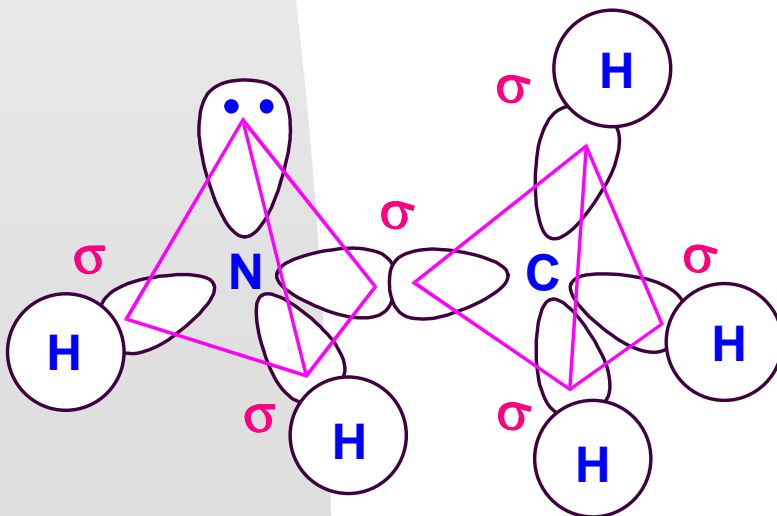


Amoniakoa: NH₃



Geometria:
tetraedrikoa

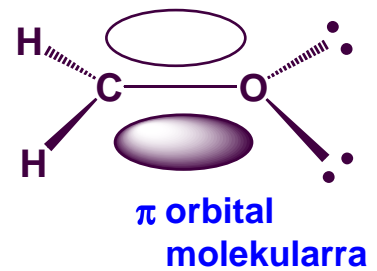
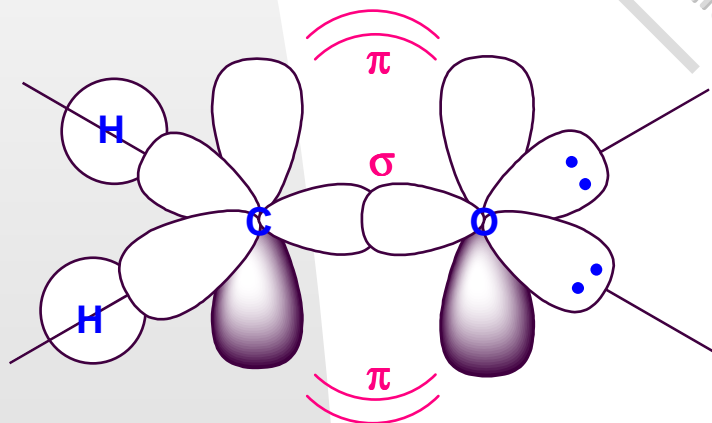
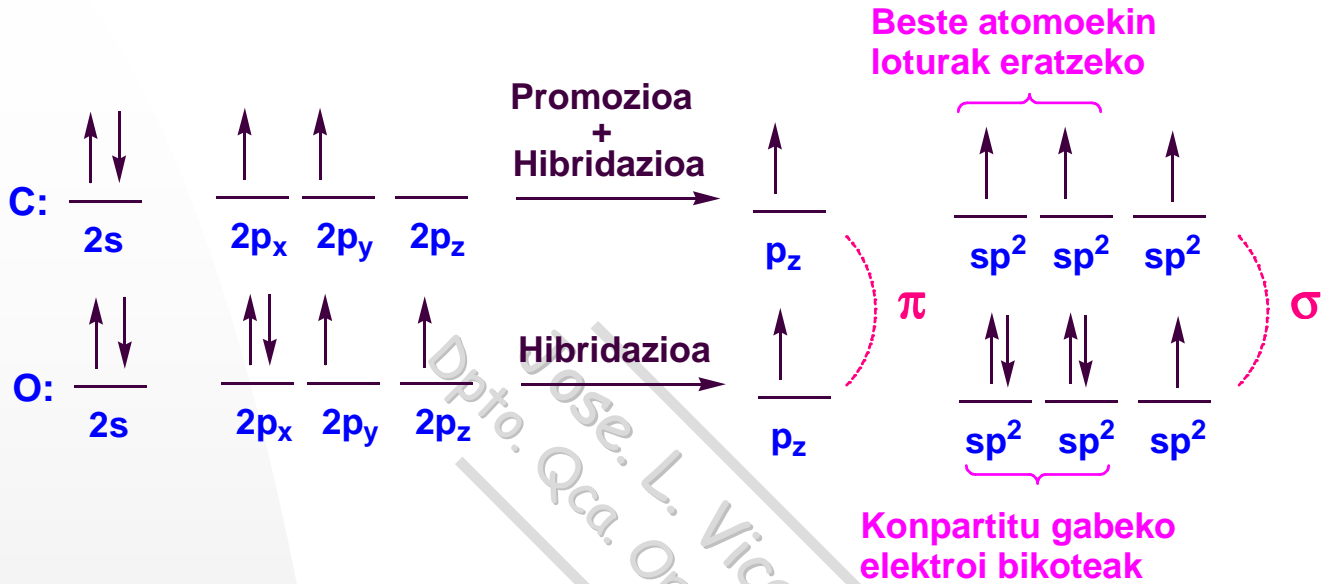
Metilamina: CH₃-NH₂



Geometria:
tetraedrikoa

2. Gaia: Beste funtzio-taldeen egitura

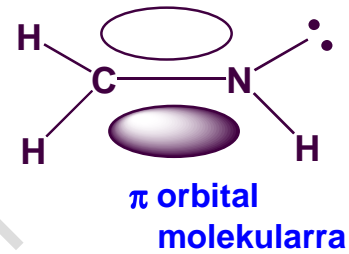
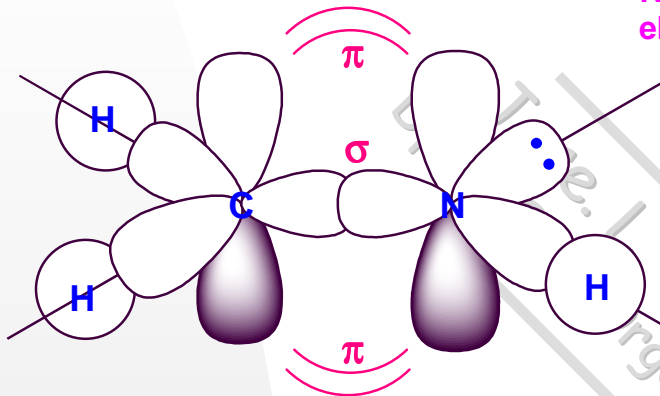
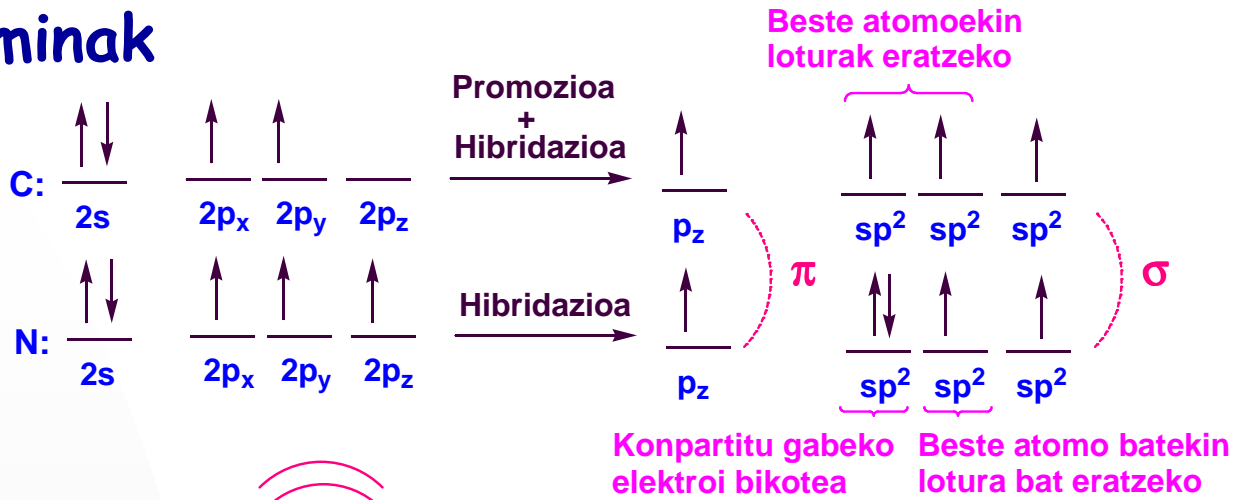
Karbonilo funtzio-taldea



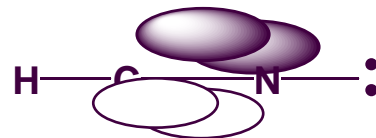
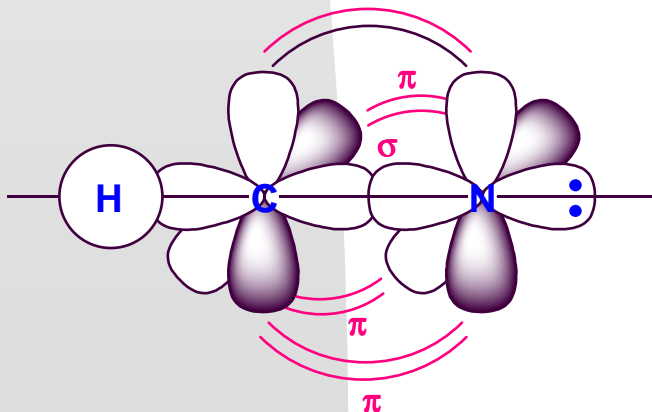
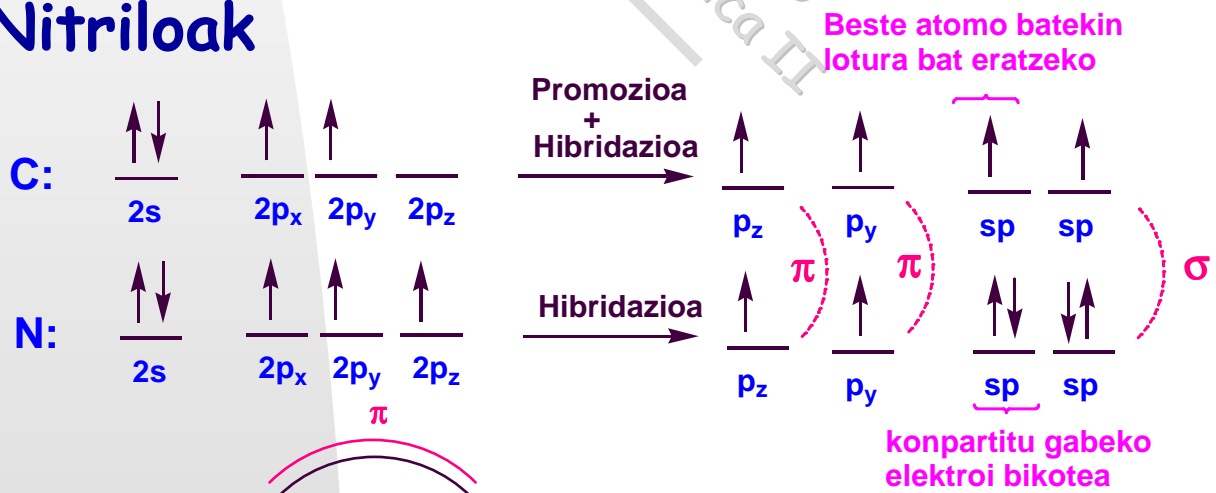
Geometria: Trigonal

2. Gaia: Beste funtzio-taldeen egitura

Iminak



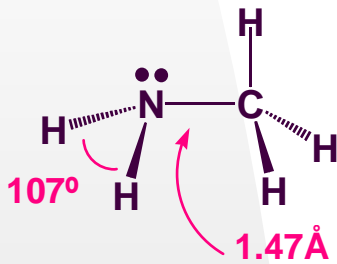
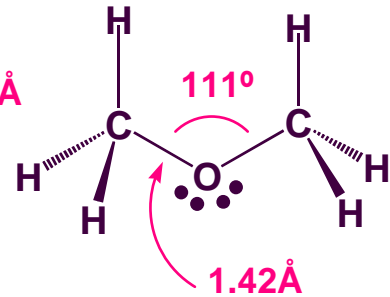
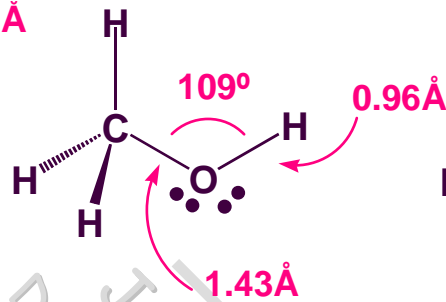
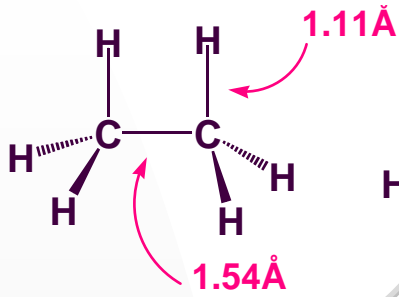
Nitriloak



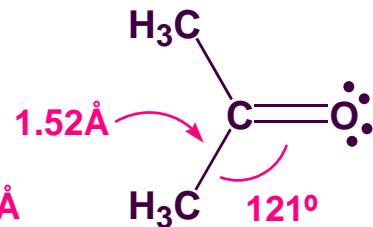
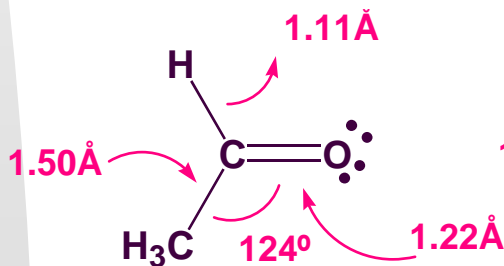
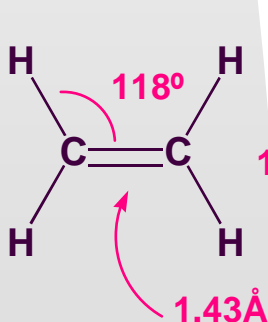
2. Gaia: Beste funtzio-taldeen egitura :

Zenbait molekulen egitura

Alkanoak, alkoholak, eterrak, aminak: **C, N, O sp^3**



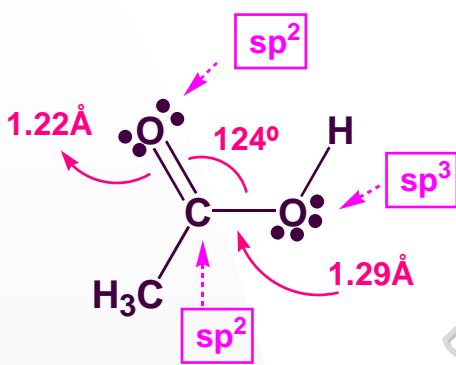
Alkenoak, aldehidoak eta zetonak: **C, O sp^2**



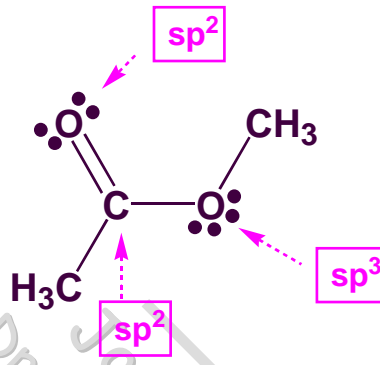
2. Gaia: Beste funtzio-taldeen egitura

Zenbait molekulen egitura

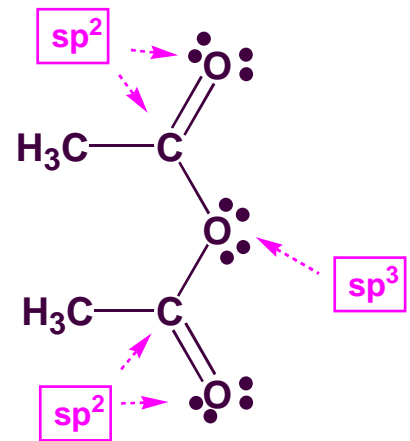
Beste konposatu karboniliko



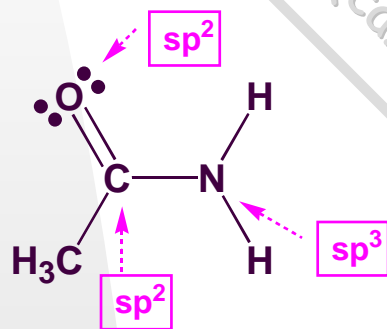
AZIDO AZETIKOA



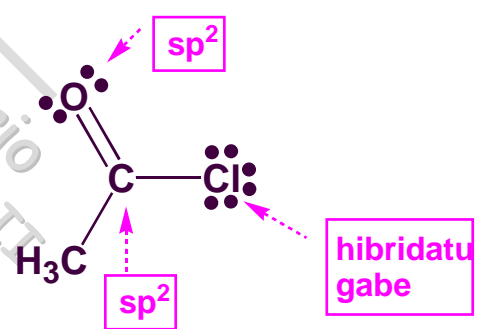
METIL AZETATOA



ANHIDRIDO AZETIKOA

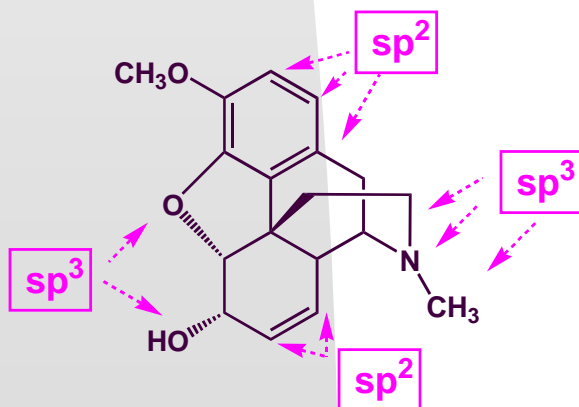


AZETAMIDA

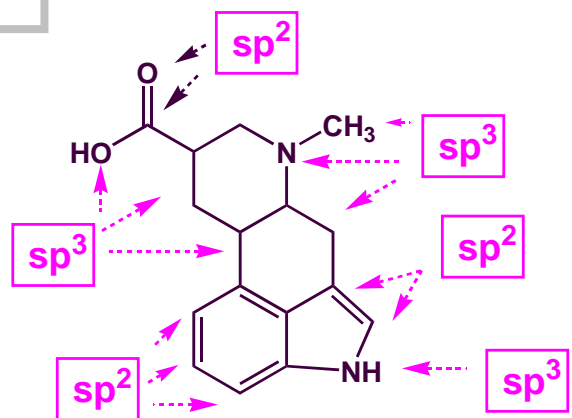


AZETIL KLORUROA

Konposatu polifunzionalizatuak



KODEINA



AZIDO LISERGIKOA

2. Gaia: Lotura kimikoa konposatu organikoetan

Bi lotura-mota

- ➔ **Lekutua:** Dentsitate elektronikoa bi nukleoaren artean konpartitzen da
- ➔ **Deslekutua:** Dentsitate elektronikoa nukleo bat baino gehiagoren artean konpartitzen da

■ Lotura lekutua

Lotura polar eta apolarrak



LOTURA KOBALENTE APOLARRA

Bi atomoen
elektrogegatibitatea
berdina



➤ Dentsitate elektronikoa era simetrikoan elkarbanatzen da O.M. osoan

dentsitate elektronikoa
handiagoa hemen



LOTURA KOBALENTE POLARRA

Bi atomoen
elektrogegatibitatea
desberdina

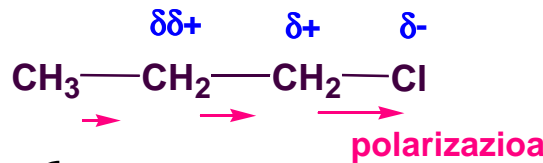


- Dentsitate elektronikoa era asimetrikoan elkarbanatzen da O.M. osoan.
- Elektroiek atomo elektronegatiboaren ondoan denbora luzeago emango dute

2. Gaia: Lotura lekutua

Efektu induktiboa

“Lotura elektronegatibitate desberdineko atomo edo atomo-bilkura batek lotura batean eragindako polarizazioa”



Bi efektu induktibo-mota

- **-I**: Elektroiak erakartzen dituzten atomoak edo atomo-bilkurak
- **+I**: Dentsitate elektronikoa ematen duten atomoak edo atomo-bilkurak

+I		-I		
-O ⁻	Negatiboki kargatuak	-NR ₃ ⁺	-COOH	-OR
-COO ⁻		-SR ₂ ⁺	-F	-COR
-CR ₃		-NR ₃ ⁺	-Cl	-SH
-CHR ₂	Alkil taldeak	-NO ₂	-Br	-OH
-CH ₂ R		-SO ₂ R	-I	-C≡CR
-CH ₃		-CN	-OAr	-Ar
-M (metala)		-SO ₂ Ar	-COOR	-CH=CHR

→ Efektu induktiboa σ loturetan zehar transmititzen da eta bere eragina nabarmen gutxitzen da katea joan ahala (3C gehienez)

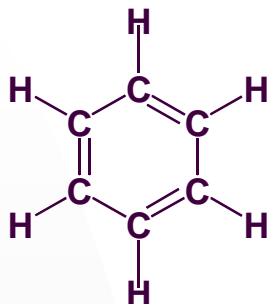
→ Salbuespen bakarra: sistema konjugatuak, transmisioa %100-a da sistema konjugatuan zehar



2. Gaia: Lotura deslektua

Lotura deslektua

Bentzenoaren egitura

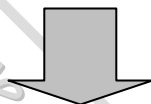


Teorian:

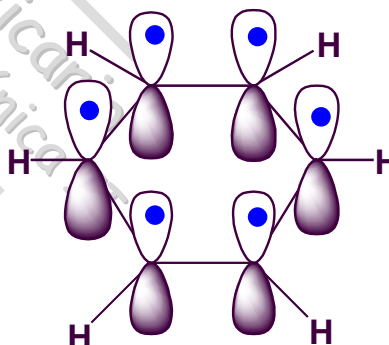
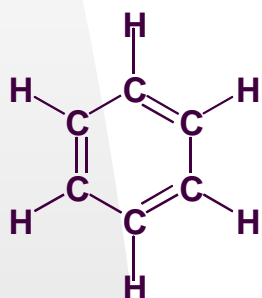
3 C=C (motzagoak) + 3 C-C (luzeagoak)

Datu esperimentalak:

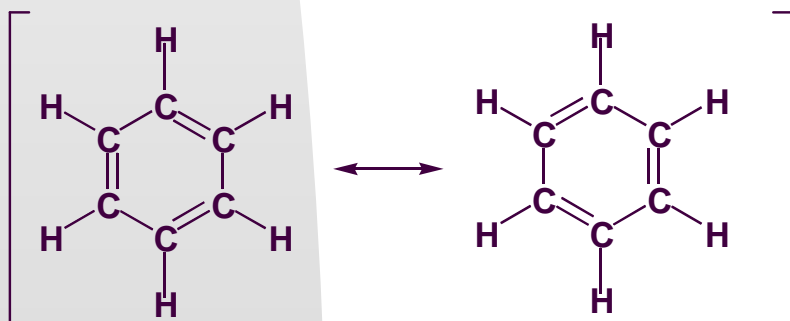
Lotura guztiak berdinak dira



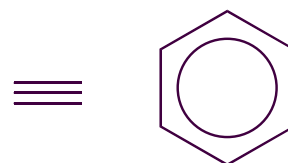
LOTURA DESLEKTUAREN KONTZEPTUA



Bentzenoaren egitura deskribatzeko:



Forma kanonikoak
edo
Erretsonantzia-egiturak



Erretsonantzia-
hibridoa

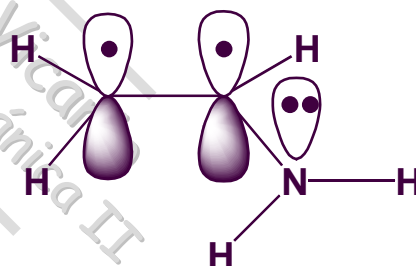
2. Gaia: Lotura deslektua

Zein kasutan agertzen da erretsonantzia?

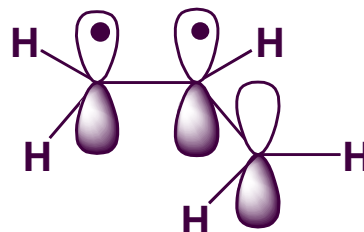
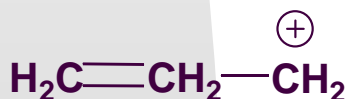
- Lotura bikoitza edo hirukoitza konjukuatuak (txandakatuak) daudenean.



- Lotura bikoitza edo hirukoitza eta alboan konpartitu gabeko elektro bikote aske baten bat daukan atomo bat dagoenean.



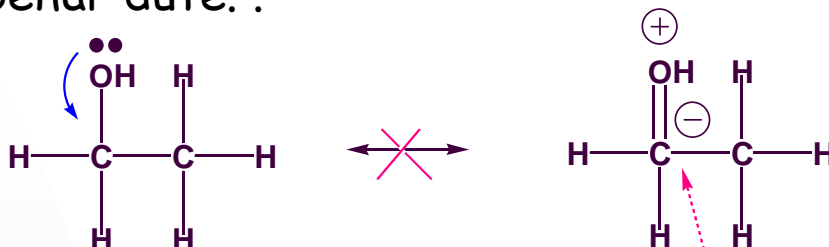
- Lotura bikoitza edo hirukoitza eta alboan hutsik dagoen p orbital baten bat daukan atomo bat dagoenean



2. Gaia: Lotura deslektua

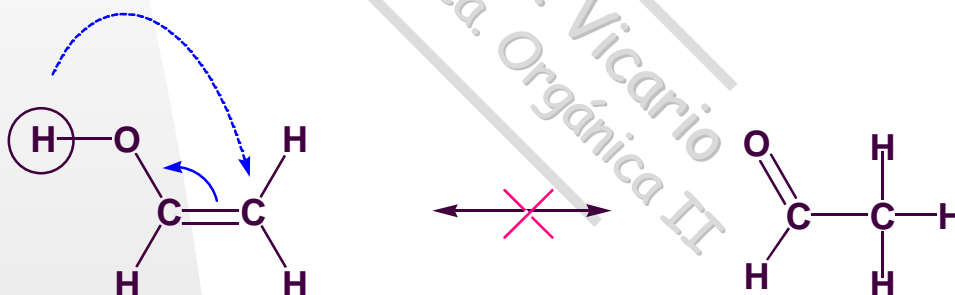
Erretsonantzia arauak

- Forma kanoniko guztiek *Lewis* egitura zuzenak izan behar dute. .

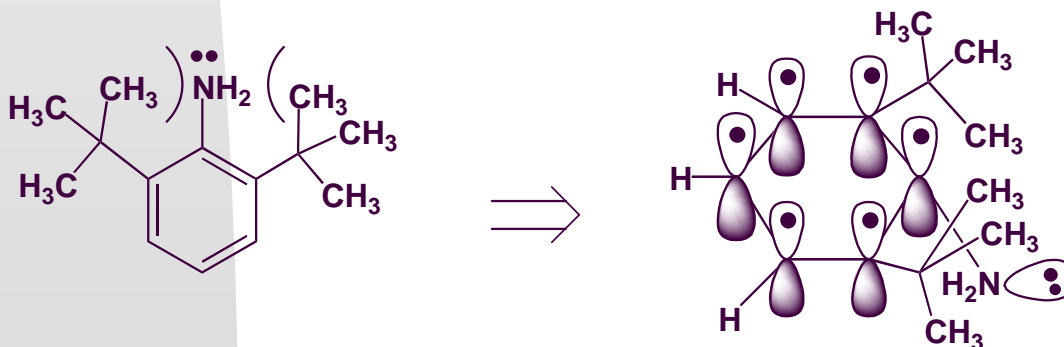


Karbono honek 10 e⁻ dauzka: ez du betetzen zortzikote araua

- Nukleo guztien kokapena mantendu behar da forma kanoniko guztietan.



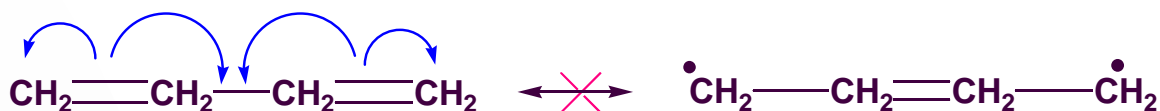
- Erretsonantzian sartzen diren atomo guztiek plano berberan egon behar dute eta π orbitalek edo elektroibikote ez-lotzaileak egokitzen dituzten p orbitalek plano horrekiko norabide perpendikularrean



2. Gaia: Lotura desleketua

Erretsonantzia arauak

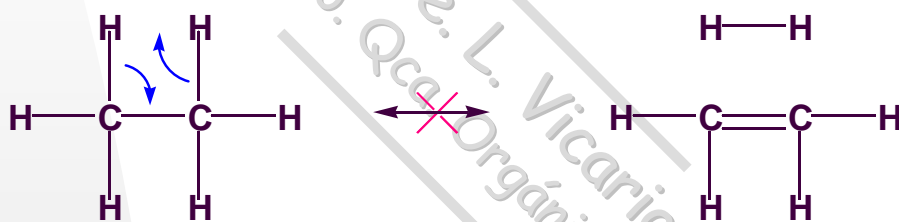
- Forma kanoniko guztiek parekatu gabeko elektroikopuru berdina izan behar dute.



Parekatu gabeko elektroirik ez

Bi parekatu gabeko elektroik

- Lotura-angeluak edo lotura-luzerak distortsionatzen dituzten egiturak ez dira forma kanonikoak.

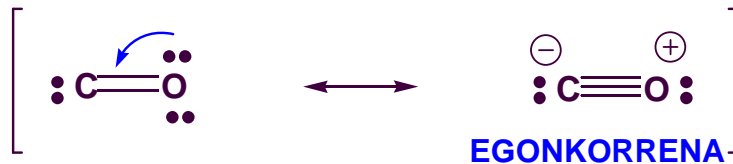


- Erretsonantzia hibridoa edozein forma kanoniko baino egitura egonkorragoa da. Erretsonantzia-hibridoak konposatuaren benetako egitura elektronikoa adierazten du.
- Erretsonantzia hibridoa forma kanoniko guztien batuketaren ondorioz sortzen da, baina forma kanoniko guztiek ez daukate erretsonantzia-hibridoaren gaineko ekarpen berbera
 - Forma kanoniko egonkorrenek ekarpen handiago daukate.
 - Erretsonantziak, konposatuei egonkortasuna ematen die.

2. Gaia: Lotura deslektua

Forma erretsonanteen egonkortasuna

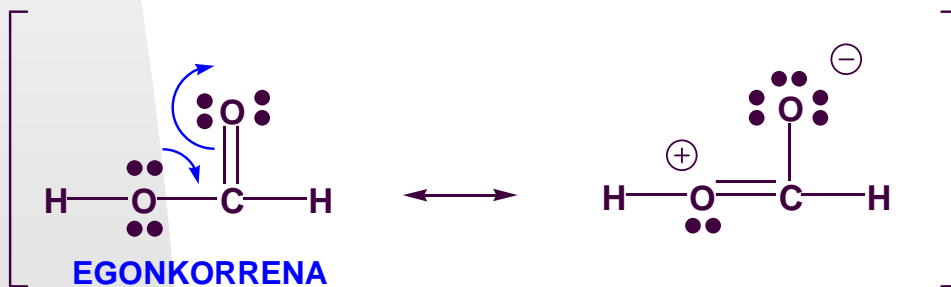
- Zortzikote osoa ez daukan egitura oso ezegonkorra da eta ia ez dauka eraginik erretsonantzia hibridoan.



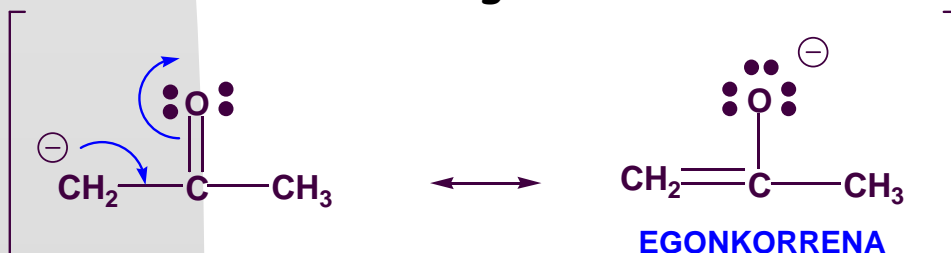
- Forma kanoniko batek zenbat eta lotura kobalente gehiago eduki, orduan eta egonkorragoa izango da.



- Forma kanoniko neutroak kargatuak baino egonkorragoak dira. Forma kanonikoa, zenbat eta karga gehiago eduki, orduan eta ezegonkorragoa izango da.



- Forma kanoniko batean karga-banaketa daukagunean, karga negatiboa atomo elektronegatibo batean daukana izango da forma kanoniko egonkorrena.

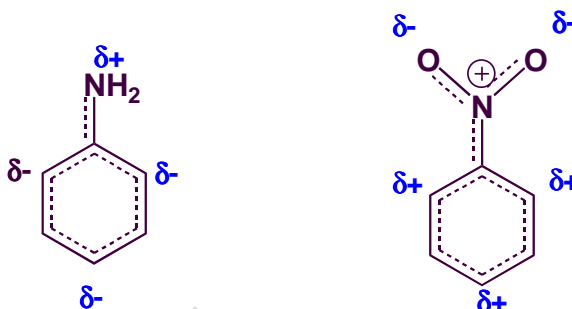


2. Gaia: Lotura deslektua

Efektu mesomeroa

“ π elektroien edo elektroikote bakartien deslektzearen ondorioz sortutako polarizazio iraunkorra”

Adib.: Anilina



Bi efektu mesomero-mota

- -M: Karga partzial negatiboa eragiten dute
- +M: Karga partzial positiboa eragiten dute

+M		-M	
-O-	-OCOR	-NO ₂	-CHO
-S-	-SR	-CN	-COR
-NR ₂	-SH	-COOH	-SO ₂ R
-NHR	-Br	-CONH ₂	-SO ₂ OR
-NH ₂	-I	-CONHR	-NO
-NHCOR	-Cl	-CONR ₂	-Ar
-OR	-F	-COOR	
-OH			

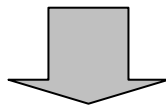
- Efektu mesomeroa, induktiboarekin konparatuz, askoz nabariagoa da, bere eragina oartzten da distantzia luzeetan eta beti magnitude berberan
- Salbuespen bakarra: halogenoak (I > M)

2. Gaia: Lotura kimikoa konposatu organikoetan

■ Molekulen arteko indarrak

Molekulen polarizazioak, konposatuen ezaugarri fisikoetan eragin handia dauka

- **URTZE-PUNTUA:** Konposatu batek solidotik likidora pasatzeko lortu behar duen tenperatura da. Urtzean, solido egoeran egoteko indarrak gainditzen dira, solidoari energia emanaz (normalean berotuz).
- **IRAKITE-PUNTUA:** Konposatu batek, egoera likidotik gas fasera pasatzeko lortu behar duen tenperatura da. Kasu honetan, ere likido egoeran egoteko indarrak gainditu behar dira eta hori lortzeko energia eman behar zaio sistemari (normalean beroa)
- **DISOLBAGARRITASUNA:** Disolbatzaileak konposatu bat disolbatzeko bere molekulak elkarrekin mantentzen dituen energia gainditu behar du. Disolbatzaile-soluto elkarrekintzari *solbatazioa* deritzo

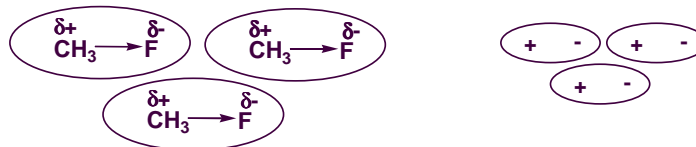


**SOLUTO-SOLUTO
INDARRAK = MOLEKULEN ARTEKO
INDARRAK**

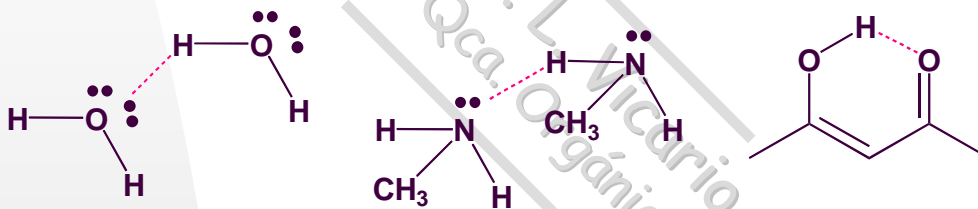
2. Gaia: Molekulen arteko indarrak

Molekulen arteko indarrak

→ **DIPOLO-DIPOLO INDARRAK:** Molekula polarren artean gertatzen dira. Molekula polar batek bere gune positiboa ondoko molekularen gune negatiboari hurbiltzeko joera izango du eta alderantziz. lotura kobalenteak baino askoz ahulagoak dira



➤ **HIDROGENO-ZUBIAK:** Hidrogeno-atomo bat oso atomo elektronegatibo batekin lotuta dagoenean



H-ZUBI INTRAMOLEKULARRA

→ **VAN DER VAALS INDARRAK:** Hodei elektronikoa etengabe mugitzen ari da eta honen ondorioz molekulen momentu dipolar txikiak sortzen dira. Askoz ahulagoak dira eta eragin hau nabaritzeko molekulek ukipean egon behar dute:

Tamaina ↑	vdw ↑	Molekula linealak	>	Molekula adarkatuak
CH_4 :	M = 16 B.p. -162°C	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$		M = 86 B.p. 69°C
	B.p. -102°C			B.p. -0.6°C