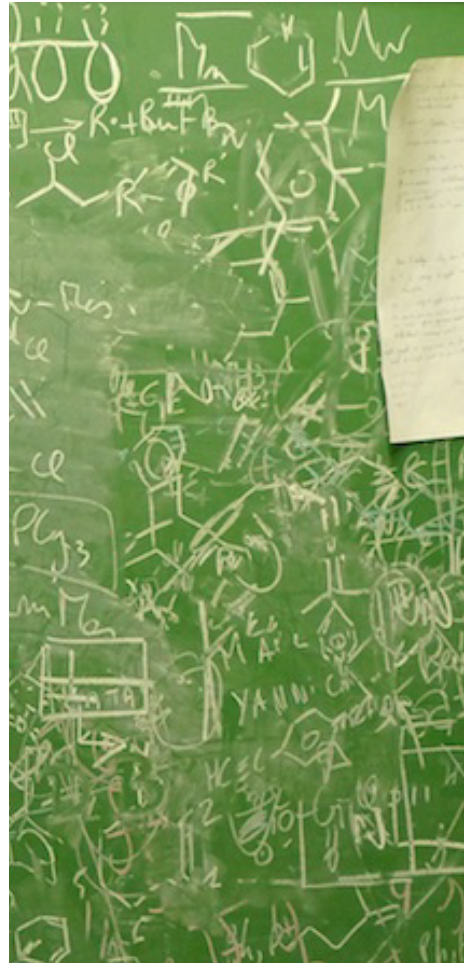
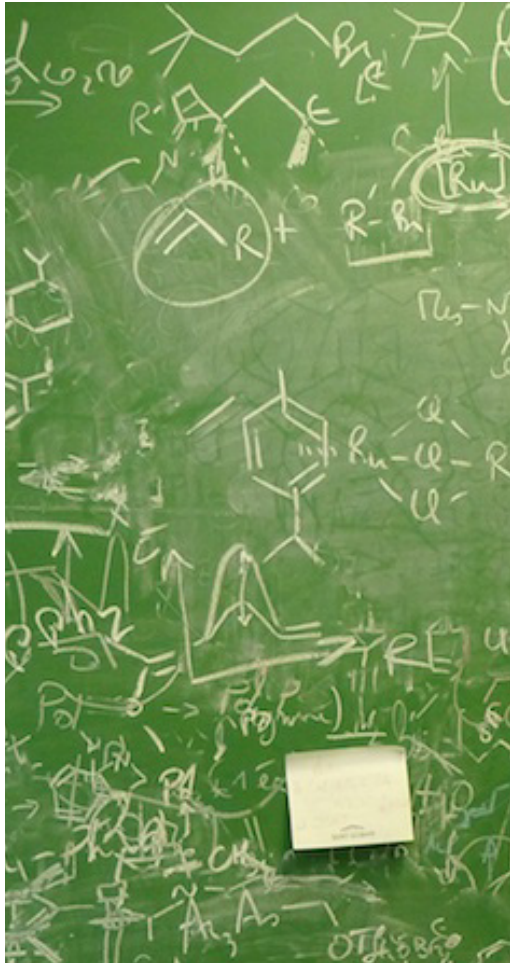




Términos, Símbolos y Conceptos EL LENGUAJE DE LA

DOI <https://doi.org/10.56604/qfla202123ORGANICA1118>

QUÍMICA ORGÁNICA



Jaime Escalante García

Profesor Investigador,
Universidad Autónoma del
Estado de Morelos, Morelos,
C.P. 62209, México
jaime@uaem.mx



José Domingo Rivera Ramírez

Profesor Investigador, Universidad
de Guadalajara, Jalisco, C.P. 44430,
México

domingo.rivera@academicos.udg.mx

Director General, Quimiofilia

La Idea Reduccionista no Abarca a la Química

Uno de los cuestionamientos más frecuentes que le expresan otras ciencias a la Química, es el uso que hace ésta última de su lenguaje y simbología exclusivas –algunos sectores de las ciencias hacen este cuestionamiento como un sensible reclamo, y esa exclusividad la entienden como una barrera poco abierta a incluir a otras ciencias–.

Este desacuerdo que tienen con la Química, ciencias como la Física y las Matemáticas, deriva probablemente de la ya tradicional idea reduccionista,¹ cuyo objetivo es alinear a la Química con la Física, así como encontrar la forma en que las afirmaciones y las herramientas de la segunda, expliquen y describan a la primera.¹ⁱ

i. Históricamente, la Química se ha desarrollado en contextos de ritualística, oficios, atención a enfermedades y desarrollo de actividades comerciales, de forma independiente y paralela al desarrollo que tuvieron la física y las matemáticas, por ejemplo: 1) **Prehistoria y Edad Antigua**: La ritualista y la preparación de alimentos, remedios y utensilios; 2) **Edad Media**: La búsqueda de longevidad y riqueza gestadas por la alquimia y la herbolaria; 3) **Revolución Industrial**: El suministro de técnica y conocimientos para el crecimiento de la minería, la apotecaria y la alfarería; 4) **Primera mitad del siglo XX**: La edificación de la industria química con fármacos, materiales y combustibles a partir de la Segunda mitad del siglo XIX; y 5) **Segunda Mitad del siglo XX**: Los esfuerzos por establecer medidas de control regulatorio, sanitario y ambiental.

Probablemente esa armonización entre la Química, la Física y las Matemáticas llegue a ocurrir e incluso a ser absoluta, pero lo cierto es que la Química puede darse a entender sin el uso de símbolos y lógica matemática, y también sin recurrir exclusivamente a descripciones físicas clásicas o cuánticas. El acervo de herramientas de la Química sigue siendo vasto, pero sobre todo pragmático; sus símbolos, conceptos y términos para describirse a sí misma, también han ayudado a otras disciplinas para darse a entender, sin descartar por ejemplo el gran avance que se ha tenido gracias a multidisciplinas como la química teórica y la fisicoquímica.

La Estructura y el Propósito del Lenguaje Químico

Para entender cómo y porqué la Química ha desarrollado un lenguaje propio, podemos apoyarnos en las aportaciones de Johnstone y Chamrat,² quienes afirman que la química debe expresar fenómenos, objetos, eventos, conceptos, ideas, procesos, mecanismos y sistemas a tres niveles: 1) microscópico (partículas, átomos, iones y moléculas), 2) macroscópico (propiedades y fenómenos físicos, mecánicos y organolépticos) y 3) simbólico (símbolos, ideogramas, modelos, gráficos, ecuaciones, operaciones y fórmulas). Estos tres niveles están íntimamente relacionados entre sí y en los tres se desenvuelven la enseñanza, el aprendizaje y el desarrollo de la Química.

La Tabla 1 resume algunos grupos de conceptos que ayudan a cada propósito.ⁱⁱ Por ejemplo, independientemente del fenómeno que se desee describir a nivel microscópico, se requiere un acervo de conceptos y definiciones que es necesario abordar de manera formal. Este nivel en muchos aspectos es difícil de describir, ya que hasta el momento no contamos con instrumentos o aparatos que nos permitan observarlo en el rango de percepción de nuestros sentidos, y sin una instrucción adecuada y formal, el proceso de aprendizaje de éste puede ser ambiguo o erróneo. El nivel simbólico también es difícil de asociar a las descripciones macroscópicas. Estas últimas son parte de nuestra vida cotidiana y son fáciles de observar, medir, percibir y describir; la mayoría tienen un efecto o manifestación biológica, natural o tecnológica, mas no así los símbolos y modelos que requieren la incorporación de un lenguaje adecuado para poder ser usados y entendidos.

ii. Los autores sugieren que el proceso de aprendizaje de estos niveles debería ser consecutivo y no paralelo, empezando con los conceptos macroscópicos, luego con los modelos estructurales o microscópicos y finalmente con los niveles simbólicos.

Tabla 1. Ejemplos de los niveles de descripción en la Química

OBJETOS O FENÓMENOS	NIVEL DE DESCRIPCIÓN		
	MICROSCÓPICO	MACROSCÓPICO	SIMBÓLICO
Átomos	Conceptos y definiciones originados por la recolección de datos y mediciones experimentales directas e indirectas en fenómenos macroscópicos. Esto origina la creación y el uso de símbolos y lenguaje	Eventos asociados a otros fenómenos y niveles de descripción	Funciones y modelos
Moléculas		- Efectos biológicos - Materiales - Propiedades	- Modelos gráficos (fórmulas, estructuras) - Modelos <i>in silico</i> - Modelos físicos (modelos moleculares) - Descriptores estereoquímicos
Enlaces		- Efectos biológicos - Materiales - Propiedades	- Modelos gráficos (fórmulas, estructuras) - Modelos <i>in silico</i> - Modelos físicos (modelos moleculares) - Modelos matemáticos - Descriptores estereoquímicos
Mecanismos		- Eventos asociados a otros fenómenos y niveles de descripción - Transformaciones y procesos - Endo y exotermas	- Modelos gráficos (fórmulas, estructuras) - Modelos <i>in silico</i> - Modelos físicos (modelos moleculares) - Modelos matemáticos - Estados de transición - Flechas - Cargas - Descriptores estereoquímicos
Transformaciones		- Eventos asociados a otros fenómenos y niveles de descripción - Transformaciones y procesos - Endo y exotermas - Cambios de estímulo organoléptico (color, olor, sabor, aspecto)	- Modelos gráficos (fórmulas, estructuras) - Modelos <i>in silico</i> - Modelos físicos (modelos moleculares) - Modelos matemáticos - Estados de transición - Flechas - Cargas - Descriptores estereoquímicos
Probabilidades			
Velocidades		- Estabilidad - Caducidades - Condiciones de almacenamiento y traslado - Envases primarios - Técnicas de manipulación - Equipo de Protección Personal	- Modelos termodinámicos - Modelos Cinéticos

Además de estos tres niveles de comunicación, uno de los propósitos primordiales de la simbología y el lenguaje en la Química, es poder establecer fenómenos de reactividad -lo cual en sí es el objetivo central de esta ciencia, más que la mera descripción de la materia y la naturaleza, lo cual quizá le compete más a la Física-. Esto tiene especial importancia para el desarrollo de la comunicación entre la Química y otras ciencias, ya que para un químico muchos fenómenos que se pueden apreciar a escalas supramoleculares complejas -como los mecanismos biológicos- tienen su origen en fenómenos discretos de interacción o reactividad química, los cuales es necesario describir apropiadamente a ese nivel. Un ejemplo que ilustra esta idea es la forma en que se generan las hélices α en las proteínas (Figura 1).

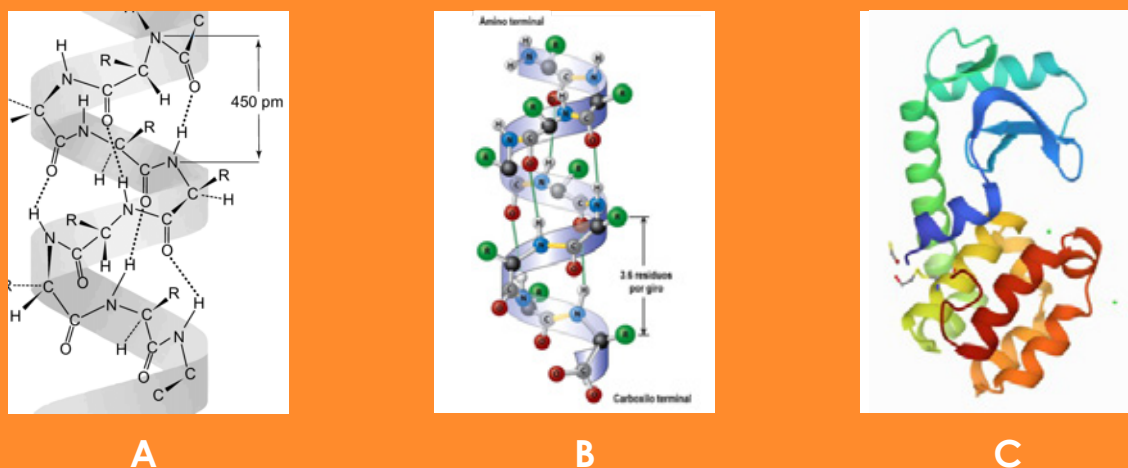


Figura 1. Tres niveles de representación de una hélice α en una proteína. A: Representación de la estructura secundaria debida a las conformaciones e interacciones de puente de hidrógeno de grupos carbonilo y amino en la columna de aminoácidos que la conforman; B: Representación de bolas (átomos) y listón de la misma estructura; C: Representación de la estructura terciaria de una proteína donde se aprecian 8 hélices α .

Es frecuente ver en los libros de texto de bioquímica, biología molecular y enzimología, las representaciones de listones de una proteína (Figura 1-C) y no es difícil introducir la idea de que se trata de plegamientos de cadenas de aminoácidos, las cuales son las responsables de la estructura secundaria y terciaria de estas biomoléculas. Si bien esta representación pareciera tener un carácter gráfico, tiene un significado bien definido y éste proviene de la simplificación de un lenguaje más elaborado, de ahí la importancia de hacer una representación apropiada. Este tipo de formaciones macromoleculares son el resultado de interacciones entre aminoácidos de la cadena principal y solo es posible explicarla y comprenderla cuando se le representa formalmente con símbolos y conceptos químicos (Figura 1-A y B). Gracias a la representación de átomos, elementos, grupos funcionales, interacciones no covalentes, orientaciones y conformaciones (los dos últimos describen arreglos

espaciales de los átomos de una manera muy precisa!), es posible representar inequívocamente la forma en que se pliega una cadena de aminoácidos para generar una hélice α .

Todos los recursos de lenguaje ilustrados en el ejemplo anterior han sido desarrollados en su mayoría por la Química Orgánica y su nivel de representación y comunicación son realmente útiles. A pesar de que aún es posible encontrar sectores científicos y profesionales que los consideran meras ilustraciones, éstos no dependen de la habilidad gráfica de un ilustrador, ya que los símbolos tienen validez, significado y uso específicos, aunque quien los represente no sea hábil dibujando cuando los usa en un pizarrón o una hoja de papel escrita a mano.

Las escalas de información y clasificación que se pueden asignar a un proceso químico son igual de

importantes que la simbología que se usa para describirlo. Consideremos el ejemplo fundamental de la química: una reacción química, la cual es un proceso por el cual ocurre una transformación de una o más sustancias para producir otras con características diferentes. Estos procesos pueden ser impulsados e influidos por diversos factores como temperatura, presión, presencia de catalizadores, retardantes, etc. En este sentido, las reacciones químicas pueden ser clasificadas de manera muy general como orgánicas o inorgánicas de acuerdo con la naturaleza de los reactantes, sin embargo, concentrándonos en las reacciones químicas orgánicas, para lograr una descripción más detallada y obtener un panorama más amplio, es pertinente llevar a cabo una clasificación más específica.

De acuerdo con cómo tienen lugar las reacciones químicas, podemos clasificarlas como reacciones de sustitución o desplazamiento, reacciones de adición, reacciones de eliminación y reacciones de transposición (también conocidas como rearrreglos químicos).³

Otra manera de clasificar las reacciones orgánicas es según el mecanismo por el cual transcurren, por ejemplo, reacciones polares (heterolíticas), reacciones por radicales libres (homolíticas) y reacciones pericíclicas o concertadas.³

Uno de los propósitos primordiales de la descripción de una reacción química es poder establecer a qué condiciones es posible llevarlas a cabo para poder controlarlas; en este contexto, “control” significa a) capacidad de ejecución, b) reproducibilidad, c) estado de equilibrio, d) velocidad de transformación, e) mecanismos de suministro o emisión de energía, f) mecanismos de reacción, g) puntos críticos y h) puntos de seguridad ambiental y personal. Todo esto permite incluirlas dentro de clasificaciones y métodos de estudio como los descritos anteriormente.

Analicemos por ejemplo a las reacciones pericíclicas, cuyos procesos se llevan a cabo en un solo paso, con formación y escisión de enlaces al mismo tiempo (procesos sincrónicos). Estas cumplen características específicas que a continuación se mencionan:

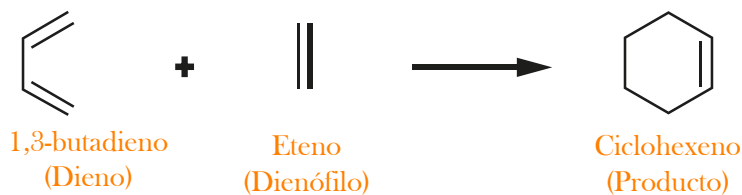
- Son procesos concertados en donde los cambios químicos se dan a través de ciclos.
- Según el suministro de energía de activación, pueden ser procesos térmicos o fotoquímicos.
- El disolvente, los medios o reactivos intervienen en la velocidad de la reacción.

- Generalmente son estereoespecíficas, con estereoquímica controlada por la vía de inducción y la simetría orbital.

Existe además, una clasificación más específica de las reacciones pericíclicas, ya que cada una de ellas tiene características particulares:

1. Reacciones de cicloadición.
2. Reacciones electrocíclicas.
3. Reacciones queletrópicas.
4. Transposiciones sigmatrópicas.
5. Transferencia de grupo.
6. Reacciones de eliminación.

Por ejemplo, en las **Reacciones de Cicloadición**, más específicamente en las reacciones de cicloadición 4+2, llamadas como Diels-Alder (Esquema 1), un dieno conjugado como el 1,3-butadieno, reacciona con un dienófilo, en este caso eteno, para formar una molécula cíclica estable, el ciclohexeno. Ésta es probablemente la reacción orgánica más conocida, y es usada ampliamente para formar anillos de 6 miembros de manera regio- y estereo- controlada.



Esquema 1. Reacción de cicloadición 4+2 o de Diels- Alder, entre un dieno (1,3-butadieno) y un dienófilo (eteno).

Con la finalidad de dar una adecuada explicación del curso de las reacciones concertadas (como también se les llama a las reacciones sincrónicas), así como predecir la posible espontaneidad de estas, Robert B. Woodward y Roald Hoffmann desarrollaron un modelo aproximado considerando las propiedades de simetría de los *Orbitales Moleculares Frontera* (OMF). En este sentido, es preciso la construcción de *Diagramas de Correlación* como los que se muestran en la Figura 1, los cuales muestran la energía relativa de los Orbitales Moleculares (OM) de las especies reactantes, sus configuraciones y el balance de los orbitales que se rompen y que se forman en una reacción, como función de la simetría molecular.

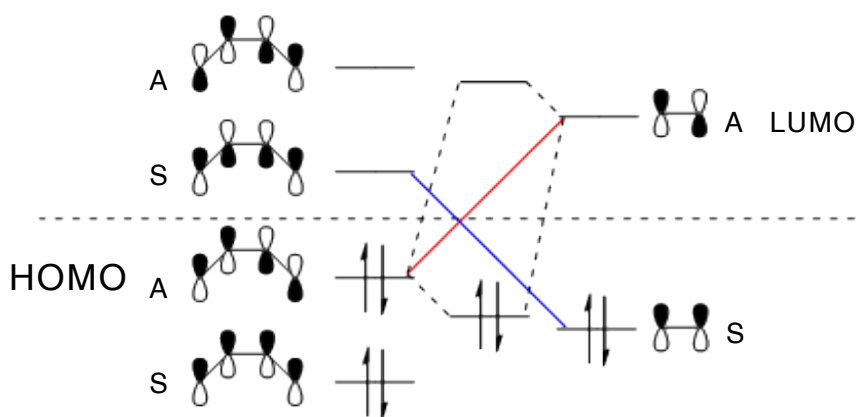


Figura 2. Diagrama de correlación de orbitales de los reactantes en la reacción de Diels-Alder.

Como sabemos, los enlaces químicos resultan del empalme (traslape) de los orbitales atómicos participantes.⁴ En este contexto, la interacción entre el orbital molecular ocupado más alto en energía (HOMO, del inglés: Highest Occupied Molecular Orbital) y el orbital molecular vacío más bajo en energía (LUMO, del inglés: Lowest Unoccupied Molecular Orbital) es la más importante para nuestro análisis, dado que el primero está ocupado y el segundo está desocupado. Nótese además, que las interacciones más importantes, son aquellas entre los orbitales más cercanos en energía y con la misma simetría puesto que darán lugar a interacciones efectivas. En nuestro caso, la interacción de los orbitales antisimétricos (A) HOMO-LUMO.

Consideremos otro ejemplo para seguir apreciando el uso de la simbología y la terminología en la Química, y en específico en la Química Orgánica. En 1957 Howard Zimmerman y Marjorie D. Traxler propusieron un estado de transición de seis miembros, con conformación de silla, para explicar la estereoselectividad de adiciones aldólicas.⁵ Este modelo, conocido como el Estado de Transición Zimmerman-Traxler, es uno de muchos ejemplos de cómo es posible emplear simbología química para explicar aspectos fenomenológicos de las transformaciones químicas.ⁱⁱⁱ Desde el punto de vista del lenguaje y la simbología química, podríamos explicarlo de la siguiente forma (Esquema 2):

Uno de los aspectos fundamentales de las transformaciones químicas es que se trata de igualdades

-estequiométricas en este caso-, por lo que se pueden expresar como una ecuación en la que la flecha representa la igualdad; en este ejemplo se muestran tres igualdades consecutivas y están asociadas mutuamente mediante la flecha de equilibrio.^{iv,6} El sentido de la escritura de una ecuación química también es importante y por convención se escribe de izquierda a derecha denotando que en dicha dirección se desplazaría el equilibrio químico.

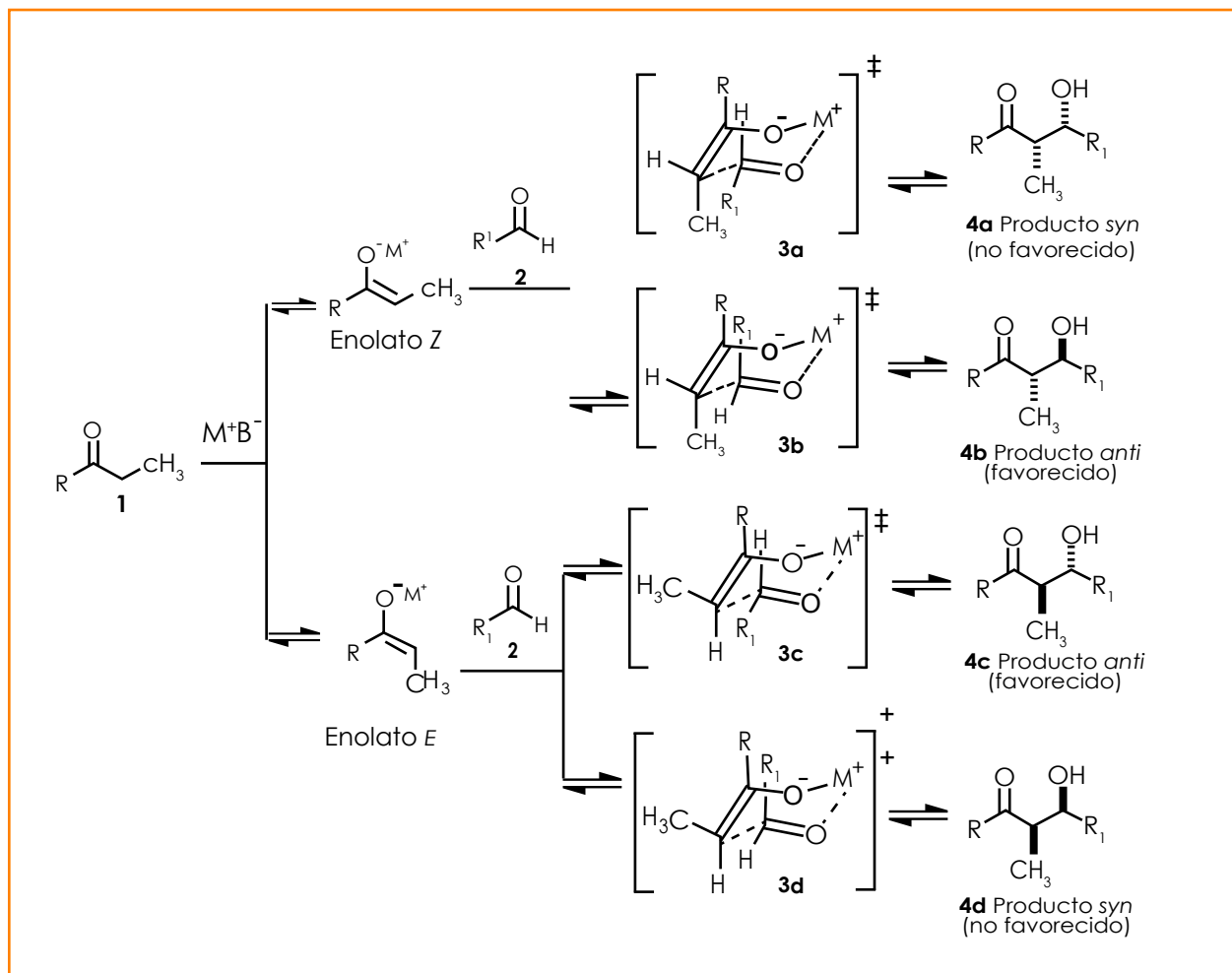
Cuando un compuesto tiene en su estructura un grupo carbonilo, como **1** y tiene un carbono α con al menos a un hidrógeno, se puede hacer reaccionar con una base metálica del tipo M^+B^- , es posible formar un ión enolato con dos conformaciones, una *Z* y una *E*. Esta sencilla denominación tiene un significado estructural bien definido y concreto, y cuando se le analiza más a fondo conlleva la comprensión de conceptos como interacciones electrostáticas, estabilidades termodinámicas y geometrías moleculares.

iii. Es innegable que Zimmerman y Traxler se apoyaron en las recientes aportaciones que en 1950 había hecho Sir Derek Barton en el tema de Análisis Conformacional.

Siguiendo el sentido de izquierda a derecha en la transformación que estamos describiendo, encontramos en la parte superior de las líneas de conexión y las flechas (que en este caso representan las posibles rutas mecanísticas que puede seguir la reacción), un segundo compuesto (**2**), el cual bajo el significado de esta notación, dicho compuesto corresponde a un reactivo sobre el cual el producto de la transformación anterior -el enolato- llevará a cabo trabajo químico; en otras

palabras, dicho ion enolato llevará a cabo una reacción de adición y en un punto de la transformación formará un estado de transición, representado entre un par de corchete y un símbolo de doble cruz: $[]^\ddagger$.

Hablando del concepto de estado de transición, éste tiene implicaciones fundamentales en el entendimiento de las transformaciones químicas, podríamos decir que representarlo y explicarlo conlleva años de adiestramiento y comprensión en temas como termodinámica y la cinética químicas, de ahí que incluirlo en un esquema no es un asunto trivial. Hablando específicamente del estado de transición Zimmerman-Traxler (**3a-d**), es una representación realmente útil de la forma en que ocurre la reacción, ya que es la esquematización de aspectos como la formación de nuevos enlaces, el espacio que ocupan los reactivos al momento de acercarse mutuamente. ¡De la correcta representación de un estado de transición se pueden discernir compuestos benéficos de los que no lo son! También es posible estimar la posibilidad de que ciertas rutas de reacción se lleven a cabo, así como sus productos correspondientes que se llegaran a aislar experimentalmente, esto también se explica en el esquema.



Esquema 2. Representación de la secuencia de transformaciones que ocurren en una condensación aldólica estereoselectiva desde el punto de vista del modelo de Zimmerman-Traxler.

Por último, al final de las flechas, se encuentran los cuatro posibles productos. Uno de los avances más significativos que brindan las representaciones químicas es que en cierta medida podemos establecer predicciones, muchas veces tan confiables como las de cualquier otro modelo. En este caso, al representar cuatro productos, no quiere decir que los cuatro se obtendrán -sin una representación o interpretación cuidadosas, esto violaría la Ley de la Conservación de la Materia- sino la posibilidad de que se puedan formar.

En la estructura de los productos **4a-d** se pueden encontrar dos de los símbolos más útiles para representar aspectos tridimensionales de las moléculas, se trata de las famosas cuñas y resortes (Figura 3). Estos sencillos símbolos abarcan conceptos profundos y específicos en el área de la stereoquímica; la IUPAC desde 1996 ha publicado interesantes recomendaciones acerca del uso de la simbología de esta área del conocimiento.⁷



Cuña

Representa que un enlace se
orienta apuntando al lector



Resorte

Representa que un enlace se aleja
del lector

Figura 3. Representaciones estereoquímicas de enlaces para denotar orientación de enlaces que emergen de un centro estereogénico.

Otros Modelos de Descripción Diferentes a la Química no Funcionarían

Imagine, o trate el lector, describir los fenómenos de los Esquemas 1 y 2 sin recurrir a simbología o lenguaje químico o usando sólo uno de ambos recursos, pero no los dos; pronto se dará cuenta que es extremadamente complejo e infructífero tratar de hacerlo. Por lo tanto, la razón por la que los químicos usamos símbolos, conceptos, descriptores y términos, es el resultado de la evolución de las ciencias químicas, pero sobre todo de la selección apropiada y sistemática de las mejores herramientas para seguir avanzando en el desarrollo científico. En tiempos de Whöler⁸ no era sencillo diferenciar a un átomo de una molécula. van 't Hoff,⁹ Fischer,¹⁰ Cahn y Barton¹¹ tuvieron que idear representaciones de los fenómenos estéricos que muestran las moléculas. Ingold se vio fuertemente motivado a descartar las descripciones mecanísticas de las reacciones que en su tiempo se consideraban válidas e infalibles.¹²

El dominio del uso y significado de la simbología química requiere de mucho tiempo de estudio y correcta instrucción, ya que sin ello es posible que muchas veces pase desapercibida su importancia.

Uno de los compromisos que como estudiantes, profesionistas y científicos podemos adoptar, es el de verificar que nuestro uso del lenguaje y la simbología sea apropiado y que, a su vez ayuda al progreso y desarrollo de esta ciencia en pro de la humanidad, la tecnología y el medio ambiente.

Bibliografía

1. Scerri, E. *Philosophy of Science*, **2007**, 74, 920-931.
2. Mekwong, S.; Chamrat, S. *Journal of Physics: Conference Series*, **2021**, 1836, 1-10.
3. McMurry, J. *Química Orgánica*. Cengage Learning, México, **2008**.
4. Juaristi y Cosío, E. *Conceptos Básicos de la Teoría Orbital*. CINVESTAV, México, **1988**.
5. Zimmerman, H. E.; Traxler, M. D. *J. Am. Chem. Soc.* **1957**, 79, 1920-1923.
6. Alvarez, S. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, 50, 2-13.
7. Moss, G. P. *Pure Appl. Chem.*, **1996**, 12, 2193-2222.
8. Nicolaou, K. C. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, 52, 131-146.
9. Ramsay, O. B. *Stereochemistry*, Heyden, USA, **1981**.
10. Nagendrappa, G. *Resonance*, **2001**, 16, 606-608.
11. Barton, D. H. R. *Experientia*, **1959**, 6, 316.
12. Ridd, J. *Chemistry World*, **2008**, December, 50-53.