



**Nombre de alumno (a): Sharon  
Berenice Cruz García**

**Nombre del profesor: Luz Elena  
Cervantes**

**Nombre del trabajo: Introducción a la  
química orgánica**

**Materia: Química orgánica**

PASIÓN POR EDUCAR

**Grado:1**

**Grupo: A**

# Conceptos básicos de la estructura atómica y molecular

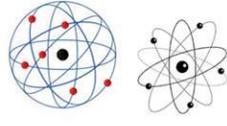
## Estructura Atómica

La teoría aceptada hoy es que el átomo se compone de un núcleo de carga positiva formado por protones y neutrones, en conjunto conocidos como nucleón, alrededor del cual se encuentra una nube de electrones de carga negativa.

## Estructura molecular

La estructura molecular puede ser descrita de diferentes formas. La fórmula química es útil para moléculas sencillas, como H<sub>2</sub>O para el agua o NH<sub>3</sub> para el amoníaco. Contiene los símbolos de cada elemento que contiene la molécula, así como su proporción por medio de los subíndices.

Para moléculas más complejas, como las que se encuentran comúnmente en química orgánica, la fórmula química no es suficiente, y vale la pena usar una fórmula estructural, que indica gráficamente la disposición espacial de los distintos grupos funcionales.

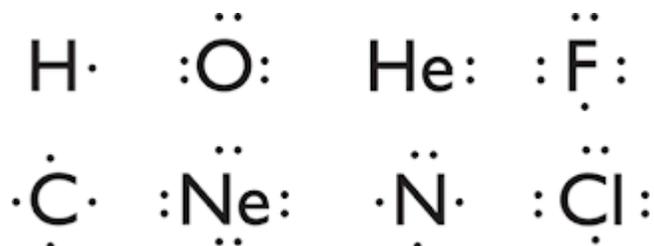
<p><b>A. Modelo de Dalton (1810)</b> Considera que los átomos son esferas sólidas, como las bolas del billar, que no pueden partirse o dividirse en partes más pequeñas. Los átomos son eléctricamente neutros, no tienen cargas eléctricas en su interior.</p>	
<p><b>B. Modelo de Thomson (1904)</b> Contempla los átomos como esferas sólidas con carga positiva que contienen corpúsculos con carga negativa, que reciben el nombre de electrones. Los átomos son eléctricamente neutros (tienen la misma cantidad de carga positiva y negativa).</p>	
<p><b>C. Modelo de Bohr (Rutherford, 1911; Bohr, 1913)</b> Considera que los átomos no son esferas sólidas, sino que están constituidos por cargas positivas concentradas en un núcleo muy pequeño, y cargas negativas que se mueven a su alrededor con el espacio vacío. En este modelo se asume que existe una gran cantidad de espacio entre los electrones, los cuales mueven órbitas concéntricas alrededor del núcleo.</p>	

## Representaciones de moléculas orgánicas a partir de estructuras de Lewis

La tendencia de los átomos a adquirir la configuración electrónica externa de 8 electrones se la conoce como regla del octeto.

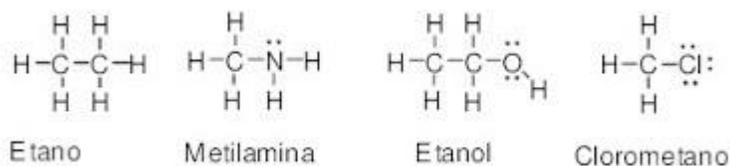
Según Lewis una capa llena de electrones es especialmente estable y los átomos transfieren o comparten electrones para tratar de alcanzar una capa llena de electrones y alcanzar, así, la estructura electrónica estable similar a la del gas noble más próximo, que normalmente contiene 8 electrones en su capa más externa.

Cuando dos átomos comparten dos electrones entre sí se forma entre ellos un enlace covalente. Los átomos, de acuerdo con su configuración electrónica, pueden cumplir la regla del octeto con pares de electrones compartidos (electrones enlazantes) y pares de electrones sin compartir (electrones no enlazantes).



Las estructuras de Lewis utilizan un punto para representar a un electrón de valencia, y un par de puntos o una línea para representar a pares de electrones. A continuación, se indica la representación de Lewis de algunas moléculas orgánicas, como el etano, la metilamina, el metanol y el clorometano. Nótese que estas tres últimas contienen átomos que consiguen su octeto electrónico mediante la suma de electrones enlazantes y no enlazantes.

Representación de Lewis de algunos compuestos orgánicos.



Como se acaba de ver, cuando se comparte un par de electrones entre dos átomos se forma un enlace simple. Muchas moléculas orgánicas contienen átomos que comparten dos pares electrónicos, como la del etileno, y se dice que estos átomos están unidos mediante un enlace doble. También hay estructuras orgánicas con átomos que comparten tres pares de electrones, como los de la molécula de acetileno, y en este caso se dice que el enlace entre los átomos es un triple enlace.

### Estructura de Lewis y resonancia

Las estructuras, diagramas o fórmulas de Lewis (USA, 1916) de una molécula son representaciones bidimensionales sencillas del esqueleto o conectividad de los átomos en la molécula y de la posición de los electrones enlazantes y no enlazantes. Tienen como finalidad explicar el enlace covalente mediante la compartición de uno o más pares de electrones entre dos átomos con el objeto de cerrar capa y conseguir así la máxima estabilidad.

1. Reglas para obtener la estructura de Lewis

1. Elegir el átomo central, que será generalmente el menos electronegativo, exceptuando el H (y generalmente el F) que siempre son terminales porque solo pueden formar un enlace. En los compuestos orgánicos siempre es el C (excepto en los éteres)
2. Alrededor del átomo central se sitúan los demás (ligandos) de la forma más simétrica posible. En los oxácidos, generalmente el H se une al O. (En CO y NO, C y N son centrales)
3. Calcular el número total de electrones de valencia de todos los átomos, añadiendo la carga neta si la hay (ejemplos: si la carga neta es -2, añadir dos electrones; si la carga neta es +1, restar un electrón). Tendremos así el número total de electrones para asignar a enlaces y átomos.
4. Dibujar un enlace entre cada par de átomos conectados, asignando a cada enlace un par de electrones que se irán restando del total.
5. Comenzando por los ligandos y terminando en el átomo central, asignar los electrones restantes, en forma de pares, a cada átomo hasta cerrar capa. El H cierra con 2. En general los átomos centrales del 2º período cierran con 8 electrones, excepto Be con 4 y B con 6. Si hay algún electrón desapareado éste se representa por un solo punto, que se situará lógicamente en el átomo central (en este caso la molécula tiene momento magnético y es paramagnética).
6. Calcular la carga formal de cada átomo comenzando por el central. La carga formal es la carga hipotética que tiene cada átomo en la estructura de Lewis y se obtiene por diferencia entre los electrones de valencia del átomo libre y los asignados en la estructura a dicho átomo, es decir:  $qf = n^{\circ} e - \text{valencia} - (n^{\circ} e - \text{no enlazantes} + \frac{1}{2} n^{\circ} e - \text{enlaces})$  o de una forma aún más simple:  $qf = n^{\circ} e - \text{valencia} - (n^{\circ} e - \text{no enlazantes} + n^{\circ} \text{enlaces})$  Las cargas formales se indican mediante un signo y número encerrado en un círculo sobre el átomo. No se indican las cargas formales nulas. La carga formal neta debe coincidir con la carga de la molécula.
7. Si la carga formal del átomo central es igual a la carga neta de la molécula o si es negativa, entonces la estructura es correcta y se termina aquí el proceso.
8. En caso contrario, modificar la estructura formando un doble enlace entorno al átomo central desplazando un par no enlazante del ligando negativo al átomo central, lo que cancela un par de cargas formales, una negativa y otra positiva. Repetir este proceso hasta: a) Si el átomo central es del 2º período: éste cierre capa (o si el número de electrones es impar, cierre con un electrón de menos). Es el caso del O<sub>3</sub>, CO, NO, HCOOH, NO<sub>3</sub><sup>-</sup> y C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>. Aunque se pudieran formar más dobles enlaces en algunos casos, no es posible porque el átomo central ya cierra capa. En el NO, el N cierra con siete electrones.
9. Se prefiere la estructura sin cargas o con la mínima carga formal, o con el menor número de átomos con carga formal. Las estructuras con cargas formales del mismo signo en átomos adyacentes son poco probables. Si debe tener carga formal, se prefiere que la carga negativa se sitúe en el átomo más electronegativo. Si se aplican bien todas las reglas enunciadas, generalmente se llega a la estructura correcta. Así, para el cloruro de carbonilo, COCl<sub>2</sub>, podemos formular algunas de las posibles estructuras, pero solo la primera, a la que se llega aplicando las reglas, es la correcta, mientras que las demás son incorrectas, tanto porque no se llega a ellas aplicando las reglas como por lo dicho en este punto noveno

10. Aparece el fenómeno de resonancia cuando se pueden escribir estructuras de Lewis equivalentes para una molécula, es decir, cuando el desplazamiento del par no enlazante para formar un doble enlace del paso 8 se puede realizar desde dos o más ligandos idénticos. Cada una de esas estructuras es una forma resonante, que se separan entre ellas mediante una flecha doble, siendo la estructura real de la molécula una mezcla de todas ellas, un híbrido de resonancia. De esta forma se obtienen dobles enlaces deslocalizados y órdenes de enlace (fraccionarios) iguales entre cada par de átomos idénticos, en concordancia con los datos experimentales. Cuántas más formas resonantes presente una molécula, menor será la energía de la misma. En los ejemplos propuestos anteriormente se presenta resonancia en el ozono y en el ion nitrato. En el ozono, en el que hay dos formas resonantes idénticas, el doble enlace deslocalizado se reparte entre dos uniones, por lo que su contribución al orden de cada enlace es  $\frac{1}{2}$ , siendo el orden de enlace entonces de  $1\frac{1}{2}$ . En el ion nitrato, con tres formas resonantes idénticas, el doble enlace deslocalizado se reparte entre tres uniones, por lo que el orden de enlace final queda en  $1\frac{1}{3}$ .

21) Hipovalencia* $\text{BF}_3$ $\begin{array}{c} \text{F} - \text{B} - \text{F} \\   \\ \text{F} \end{array}$	22) $\text{PF}_3$ $\begin{array}{c} \text{F} - \text{P} - \text{F} \\   \\ \text{F} \end{array}$
23) Hipovalencia* $\text{BeH}_2$ H-Be-H	24) $\text{CH}_4$ $\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H} - \text{C} - \text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$
25) Resonancia* $\text{NO}_2^-$ $\left[ \text{O} = \text{N} - \text{O} \right]^- \leftrightarrow \left[ \text{O} - \text{N} = \text{O} \right]^-$	26) Resonancia* $\text{O}_3$ $\left[ \text{O} = \text{O} - \text{O} \right] \leftrightarrow \left[ \text{O} - \text{O} = \text{O} \right]$
27) Hipovalencia* $\text{BeCl}_2$ $\left[ \text{Cl} - \text{Be} - \text{Cl} \right]$	28) Hipovalencia* $\text{BH}_3$ $\begin{array}{c} \text{H} - \text{B} - \text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$
29) $\text{NH}_3$ $\begin{array}{c} \text{H} - \text{N} - \text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$	30) $\text{CCl}_4$ $\begin{array}{c} \text{Cl} \\   \\ \text{Cl} - \text{C} - \text{Cl} \\   \\ \text{Cl} \end{array}$
31) $\text{CH}_3\text{Cl}$ $\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H} - \text{C} - \text{Cl} \\   \\ \text{H} \end{array}$	32) $\text{NH}_4^+$ $\left[ \begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H} - \text{N} - \text{H} \\   \\ \text{H} \end{array} \right]^+$ Enlace dativo*
33) $\text{PO}_4^{3-}$ $\left[ \begin{array}{c} \text{O} \\   \\ \text{O} - \text{P} - \text{O} \\   \\ \text{O} \end{array} \right]^{3-}$	34) $\text{SO}_4^{2-}$ $\left[ \begin{array}{c} \text{O} \\   \\ \text{O} - \text{S} - \text{O} \\   \\ \text{O} \end{array} \right]^{2-}$
35) Hipervalencia* $\text{PCl}_5$ $\begin{array}{c} \text{Cl} \\   \\ \text{Cl} - \text{P} - \text{Cl} \\   \quad   \\ \text{Cl} \quad \text{Cl} \end{array}$	36) $\text{ClO}_3^-$ $\left[ \begin{array}{c} \text{O} - \text{Cl} - \text{O} \\   \\ \text{O} \end{array} \right]^-$

Posorio

@QuímicaPau

## Geometría molecular de Lewis y resonancia

La geometría molecular es la disposición tridimensional de los átomos que conforman una molécula. Es muy importante conocer correctamente la geometría de una molécula, ya que está relacionada directamente con la mayoría de propiedades físicas y químicas, como por ejemplo, punto de ebullición, densidad, solubilidad, etc.

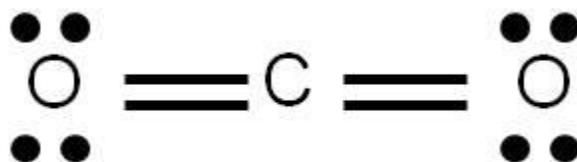
Si conocemos la estructura de Lewis de una molécula, podremos predecir su geometría utilizando la teoría de repulsión de pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV). Esta teoría

se basa en el hecho que los electrones tienden a repelerse entre sí (por similitud de cargas). Por tal motivo, los orbitales que contienen a los electrones se orientan de tal forma que queden lo más alejados entre sí.

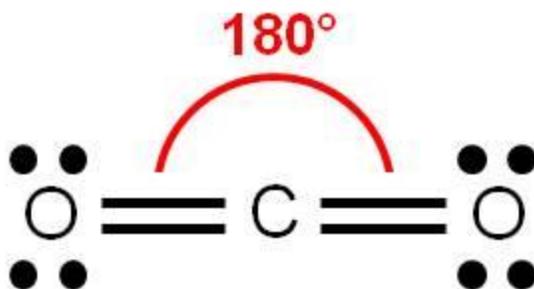
Es importante notar que la geometría de la molécula está referida siempre al átomo central, y que, para determinarla correctamente, debemos conocer el número de coordinación total de dicho átomo.

$$\text{N}^\circ \text{ coordinación} = \text{N}^\circ \text{ átomos unidos} + \text{N}^\circ \text{ pares libres}$$

Previamente hemos determinado su estructura de Lewis, la cual es la siguiente:



Determinemos el número de coordinación del carbono (átomo central): tiene dos átomos unidos y ningún par libre. Por tanto, su número de coordinación es 2, debido a los dos átomos de oxígeno unidos. Estos átomos querrán estar lo más alejado posible entre sí, y para ello, **deberán oponerse entre sí 180°**.

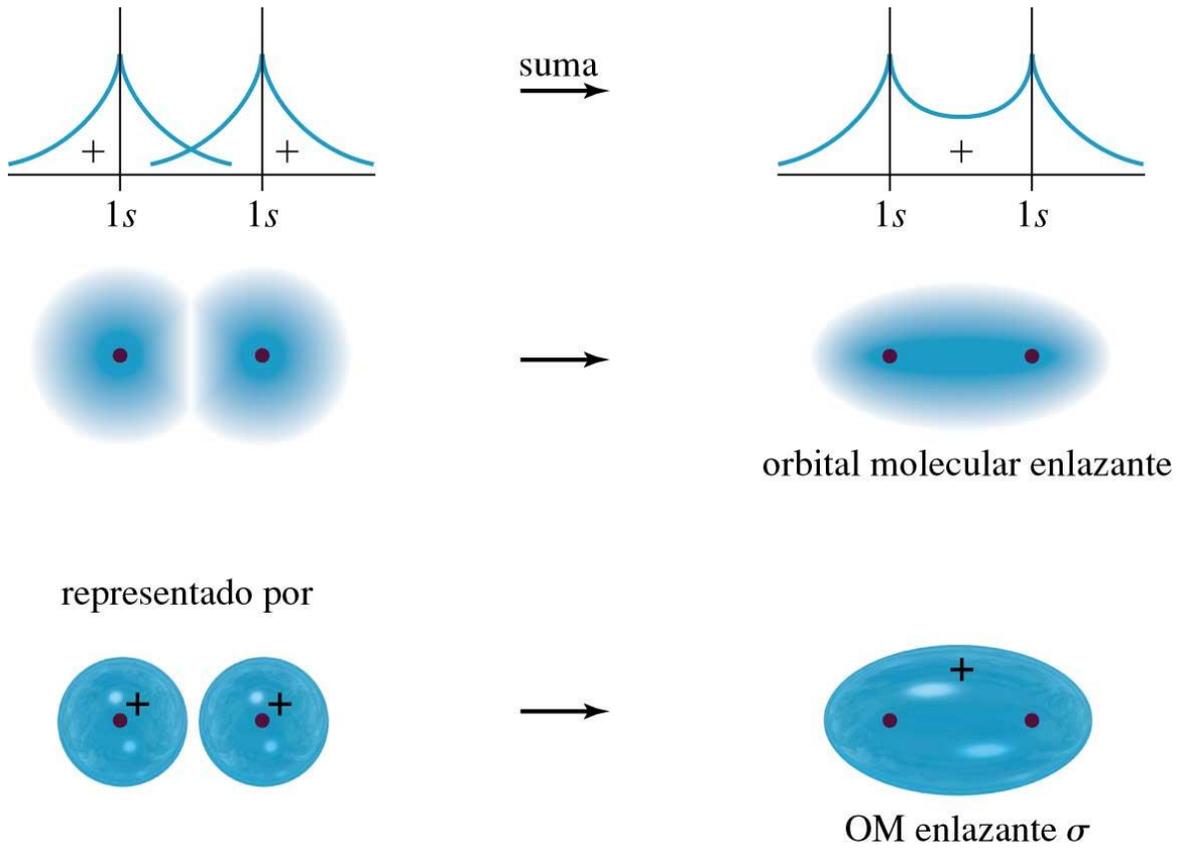


Por tanto, dado que los tres átomos pueden ser colocados a lo largo de una línea recta, decimos que la geometría de la molécula de CO<sub>2</sub> es **LINEA**

Estructura y propiedades de las moléculas

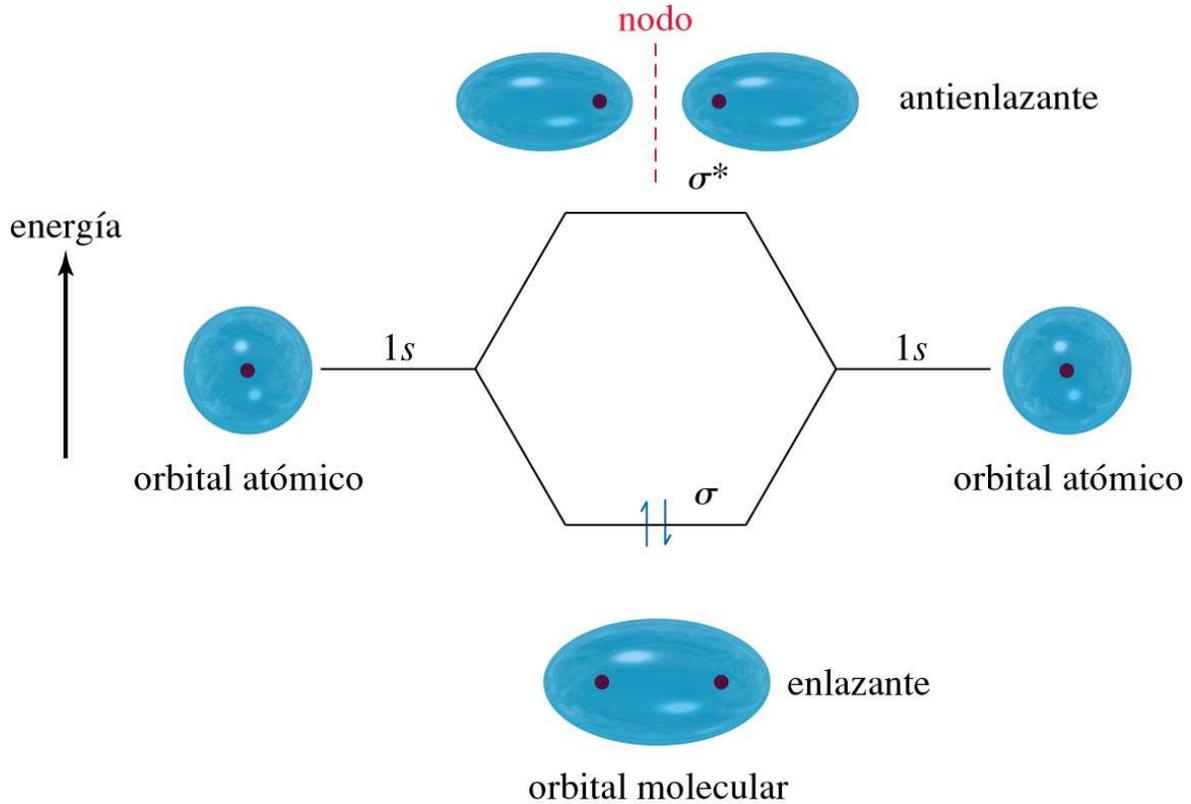


**Formación de un OM enlazante  $\sigma$ .**



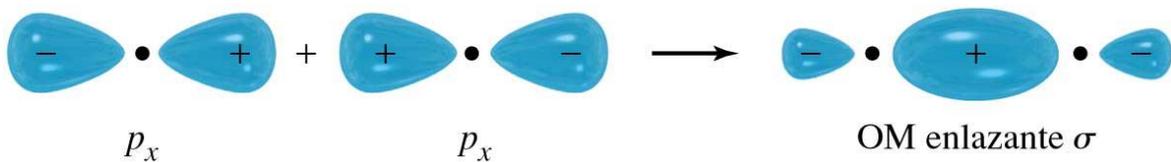
## Orbitales moleculares de hidrógeno

Cuando los orbitales 1s de dos átomos de hidrógeno se solapan, se forma un OM enlazante sigma y un OM antienlazante sigma. Dos electrones (representados por flechas) ocupan el OM enlazante con espines opuestos, formando una molécula de H<sub>2</sub> estable



## Formación de un OM enlazante $\sigma^*$ a partir de orbitales $p$ .

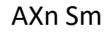
Cuando dos orbitales  $p$  se solapan a lo largo de la línea entre los núcleos, se forma un orbital molecular antienlazante. Una vez más, la mayoría de la densidad electrónica se concentra a lo largo de la línea internuclear. El solapamiento constructivo de dos orbitales  $p$  a lo largo de la línea que une los núcleos forma un enlace  $\sigma$  representado de la manera siguiente:



Dos orbitales  $p$  se solaparán para formar dos orbitales moleculares; un OM enlazante (mostrado) y un OM antienlazante (no mostrado). El OM enlazante sigma tiene su región electrónica entre los dos núcleos.

## Modelo de repulsión del par electrónico de la capa de valencia

Este modelo fue propuesto por R. J. Gillespie y R. S. Nyholm en 1957. Es extraordinariamente útil para predecir la estructura de cualquier molécula de fórmula general



A = átomo central.

X = átomos ligantes

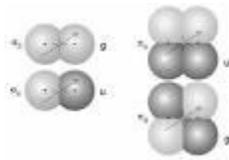
Cubre satisfactoriamente una gran cantidad de casos, la siguiente es una cita de Gillespie  $S =$  par de electrones no enlazante o solitario.

El modelo RPECV parte de la idea como su nombre lo indica, de que los electrones alrededor de A están pareados (con espines opuestos). Los pares adquieren en el espacio una posición de tal que cada uno esté lo más alejado posible de los demás

Pares de Electrones Compartidos	Pares de Electrones Solitarios	Distribución	Geometría	Ángulo de Enlace Ideal	Ejemplo	Imagen
2	0	Lineal	Lineal	$180^\circ$	$BeCl_2$	
3	0	Plano Trigonal	Plano Triangular	$120^\circ$	$BF_3$	
2	1	Plano Trigonal	Angular	$120^\circ$	$SO_2$	
4	0	Tetraédrica	Tetraédrica	$109.47^\circ (\cos^{-1}(1/3))$	$CH_4$	
3	1	Tetraédrica	Piramidal Trigonal	$109.47^\circ (\cos^{-1}(1/3))$ ( $107.5^\circ$ )	$NH_3$	
2	2	Tetraédrica	Angular	$109.47^\circ (\cos^{-1}(1/3))$ ( $104.5^\circ$ )	$H_2O$	
5	0	Bipiramidal Trigonal	Bipiramidal Trigonal	$90^\circ, 120^\circ$	$PCl_5$	
4	1	Bipiramidal Trigonal	Tetraédrica Irregular (Balancín)	$90^\circ, 120^\circ$	$SF_4$	
3	2	Bipiramidal Trigonal	Forma de T	$90^\circ$	$ClF_3$	

## Modelo del orbital molecular

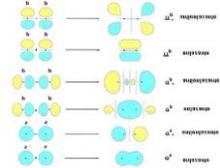
**Orbitales moleculares** que son orbitales que dejan de pertenecer a un solo núcleo para pasar a depender de dos o más núcleos. El tratamiento matemático que utiliza la Mecánica Cuántica para el cálculo de los orbitales moleculares es el método de la combinación lineal de orbitales atómicos, o método CLOA, que considera que el orbital molecular,  $\psi$ , es el resultado de la combinación lineal, es decir, una suma o una resta, de los dos orbitales atómicos implicados,  $F_1$  y  $F_2$ .



## Teoría de orbitales moleculares

### Orbitales moleculares S

El orbital molecular enlazante descrito para la molécula de hidrógeno, que tiene forma elipsoidal (simétrico respecto al eje de unión de los dos núcleos), recibe el nombre de orbital molecular s(sigma) y el enlace covalente resultante, enlaces. Análogamente el orbital molecular antienlazante correspondiente recibe el nombre de orbitales\* (sigma estrella o sigma asterisco). Por solapamiento o interacción de dos orbitales atómicos de tipo s se forman siempre orbitales moleculares de tipo s. Pero también a partir de orbitales p se pueden formar orbitales y enlaces s. Así, por ejemplo, cuando un orbital p interacciona con un orbital s se llega a sendos orbitales moleculares s, uno enlazante



### Orbitales moleculares p

Pero a partir de dos orbitales atómicos p puede originarse otro tipo de orbitales moleculares. En efecto, el solapamiento o interacción entre los dos orbitales atómicos p puede tener lugar lateralmente para dar lugar a dos orbitales moleculares del tipo p(pi), uno enlazante, de menor energía que los atómicos de partida, y otro antienlazante, de mayor energía y con un nodo: Como los orbitales atómicos de partida, los orbitales moleculares de tipo p también poseen zonas de distinto signo separadas por un plano nodal. El orbital molecular p enlazante está formado por dos lóbulos de distinto signo en los que la probabilidad de encontrar a los electrones es máxima, separados por un plano nodal que pasa por los dos núcleos. Es decir, en el orbital enlazante, los dos núcleos de los átomos que aportan los orbitales p quedan unidos por dos zonas o nubes p, una superior y otra inferior de distinto signo

## BIBLIOGRAFÍA

Atkins, P. W. Química Física. 6ª Edición, Ediciones Omega, Barcelona, 1999.

<http://qumicaorganica1.blogspot.com/2008/11/1-conceptos-bsicos-de-estructura-atmica.htm>

<http://asesorias.cuautitlan2.unam.mx/inorganica/profes/ofe/apuntes/repulsion.pdf>

<http://organica1.org/teoria1411/2.ppt>

<http://corinto.pucp.edu.pe/quimicageneral/contenido/344-geometria-molecular-teoria-rpevcv.html>

[http://www.qorganica.es/QOT/T1/estructuras\\_resonantes\\_exported/index.html](http://www.qorganica.es/QOT/T1/estructuras_resonantes_exported/index.html)

<http://3mediosselectivosquimica.blogspot.com/2010/08/representacion-de-lewis-de-las.html>