

**Nombre del Alumno:**

Sofía Yamileth Guillén Flores

**Nombre del Profesor:**

Luz Elena Cervantes Monroy

**Nombre del Trabajo:**

Súper Nota

**Materia:**

Química Orgánica

**Grado:**

Primer Cuatrimestre

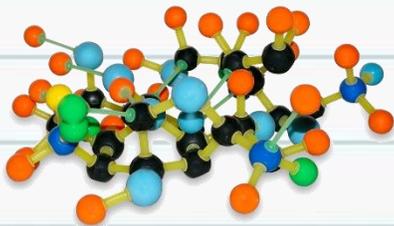
**Grupo:**

LNU-01

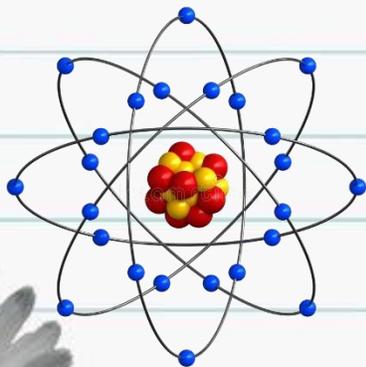
Comitán de Domínguez, Chiapas a 23 de Septiembre del 2022

# Conceptos básicos de la estructura atómica y molecular

Teoría atómica: En 1808, John Dalton da la hipótesis de su teoría atómica, elementos, formados por partículas pequeñas (átomos). Compuestos, formados por átomos de más de un elemento, Una reacción química es la separación, combinación o reordenamiento de los átomos



El átomo: Unidad básica que puede intervenir en una combinación química. Los electrones: partículas con carga (-) se encuentran en lugares energéticos conocidos como orbitales. Los protones: partículas con carga (+) se encuentran en el núcleo atómico. Los neutrones: partículas eléctricamente neutras, que se encuentran en el núcleo



Modelos atómicos: Bohr propuso un modelo planetario: en el centro del átomo se encontraba el núcleo donde están los protones y los neutrones y rodeando dicho núcleo, los electrones giraban distribuidos en capas o niveles energéticos

Configuración electrónica: Disposición de los electrones en los diversos orbitales atómicos, un orbital no puede tener + de 2 electrones, los cuales deben girar en direcciones opuestas, no se juntan en un orbital si existe otro disponible con la misma energía.



# Estructuras de Lewis y resonancia

Reactividad de un compuesto, su estabilidad, el cómo y qué mecanismo seguirá la molécula cuando reacciones

Se aplica la fórmula matemática, conociendo a que grupo pertenecen.

$C = N - D$

C significa electrones compartidos

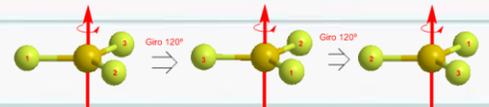
N son los electrones necesarios

D son los electrones disponibles



Los átomos - electronegativos la mayoría de las estructuras ocupan los centros. Es importante resaltar que los hidrógenos normalmente se enlazan a los átomos muy electronegativos. Hay excepciones a esta regla, pero ocurre por lo general con átomos no metálicos

Simetría: La naturaleza tiene una alta preferencia por originar estructuras moleculares lo más simétricas posibles, evita poner estructuras desordenadas, con los átomos dispuestos, que no obedecen ningún patrón aparente.

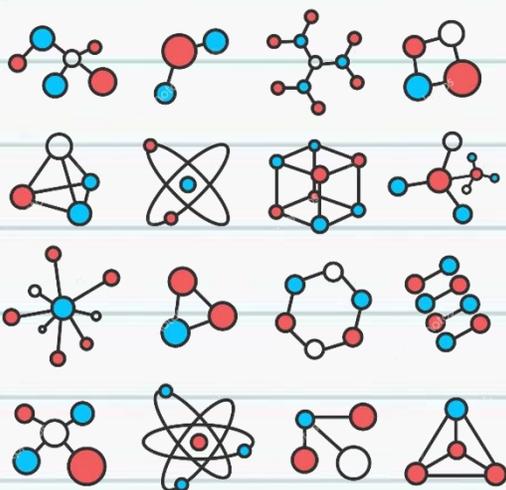


Las cargas formales: se pueden agregar o quitar enlaces de forma que la carga formal de un átomo corresponda a la carga total exhibida. Este criterio es de mucha ayuda para los compuestos de los metales de transición.



# Geometría molecular a partir de estructuras de Lewis

Distribución espacial de átomos alrededor de un átomo central, representan regiones donde existe una alta densidad electrónica, y se consideran por tanto grupos electrónicos, sin importar los enlaces que formen (simples, dobles o triples)



Tipos de formas:

Geometría lineal -Eileno  $H_2C \equiv CH_2$

Geometría angular -El agua

Plana trigonal -Trifluoruro de bromo,  $BF_3$

Tetraédrica -Gas metano,  $CH_4$

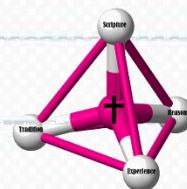
Pirámide trigonal -Amoníaco,  $NH_3$

Epirámide trigonal -Pentafluoruro de fósforo,  $PF_5$

Oscilante Tetrafluoruro de azufre,  $SF_4$

Forma de T -Tricloruro de yodo,  $ICl_3$

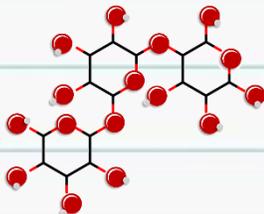
La geometría molecular explica las observaciones de las propiedades químicas/físicas de la materia. se orienta de acuerdo a la geometría electrónica, de manera que esta última debe determinarse siempre antes que la primera



Posición axial el par de electrones "presión" perpendicularmente ( $90^\circ$ ) sobre base triangular. menos de geometría -, en la tetraédrica, la angular y la pirámide trigonal, átomos centrales tienen hibridación  $sp^3$ , según la TEV.

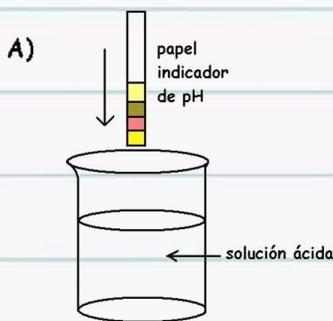
# Estructura y propiedades de las moléculas

Fuerzas intermoleculares influyen en las propiedades físicas de los compuestos orgánicos. el punto de ebullición de un compuesto depende de la tracción entre las moléculas, las fuerzas intermoleculares son débiles, una cantidad de energía relativamente (-) será necesaria para separar las moléculas unas de otras



Punto de fusión: Temperatura a la que un sólido se convierte en líquido. En este caso el factor que influye en el valor del punto de fusión es el empaquetamiento de las moléculas

Solubilidad: Además de afectar a los puntos de ebullición y de fusión, las fuerzas intermoleculares determinan la solubilidad de los compuestos orgánicos.



Acidez en las moléculas orgánicas: Según la teoría de Arrhenius, (siglo XIX), ácido es una sustancia que se ioniza en disolución dando iones  $H^+$  y una base es una sustancia que se ioniza en disolución generando aniones hidroxilos ( $OH^-$ ).

Efecto inductivo y fuerza ácida: Sustituyente que estabilice al anión carboxilato aumenta la disociación, produce ácido más fuerte, átomos electronegativos aumentan fuerza de un ácido su efecto inductivo electrón-atrayente contribuye a des localizar la carga negativa del anión carboxilato.



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

Propuesto por R. J. Gillespie y R. S. Nyholm en 1957. Es útil para predecir la estructura de cualquier molécula de fórmula general:  $AX_n S_m A$  = átomo central. X = átomos ligantes S = par de electrones no enlazante o solitario



**REGLA PRIMERA:** Establecida geometría de molécula, pueden ser entendidas pequeñas diferencias. Los pares solitarios repelen a otros pares electrónicos cercano enlace.  
**REGLA SEGUNDA:** Repulsión entre pares de electrones compartidos decrece con el incremento de la electronegatividad del ligante, X

**REGLA TERCERA:** Repulsión de pares de electrones compartidos que son de un enlace múltiple es mayor que la de pares de electrones compartidos de enlaces simples.  
**REGLA CUARTA:** Las repulsiones entre pares de electrones en capas llenas es mayor que aquella entre pares de electrones en capas incompleta.

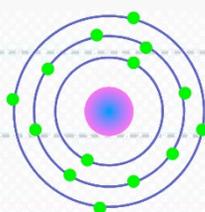


**REGLA QUINTA:** Átomo con una capa de valencia completa y 1 o + pares de electrones solitarios se une a otro átomo que tiene su capa de valencia incompleta, se presenta los pares de electrones solitarios a transferirse parcialmente e la capa llena a la incompleta.  
**REGLA SEXTA:** Capa de valencia que contenga 5 pares de electrones (no todos son equivalentes), aquellos que tengan mayor número de vecinos cercanos estarán a una distancia mayor que los otros



# Modelo del orbital molecular

Este modelo considera que los electrones de una molécula ocupan orbitales moleculares, al igual que en un átomo los electrones ocupan orbitales atómicos



Esto define tipos de orbitales moleculares enlazantes y antienlazantes

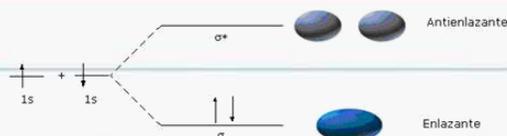


QM Enlazante

Energía menor que el orbital de partida

Interferencia constructiva

Genera Enlace Químico



QM Antienlazante

Interferencia destructiva

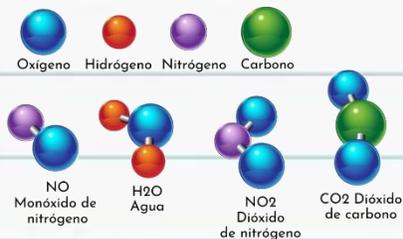
Energía mayor que el orbital de partida

Orbital Antienlazante (densidad electrónica baja entre núcleos)



# Tipos de enlaces existentes en compuestos orgánicos

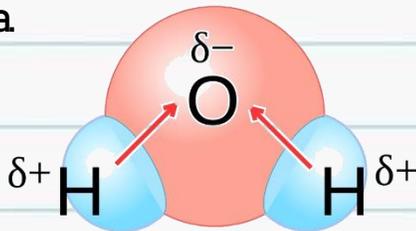
El enlace covalente es la unión que explica el mantenimiento de la unidad estructural de un compuesto orgánico.



Los puntos de fusión, de ebullición y las solubilidades de los compuestos orgánicos muestran los efectos de estas fuerzas.

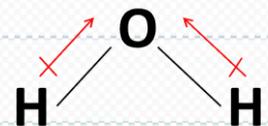
## Polaridad de las moléculas

Propiedad de las moléculas que representa la separación de las cargas eléctricas dentro de la molécula, según el número y tipo de enlaces que posea.



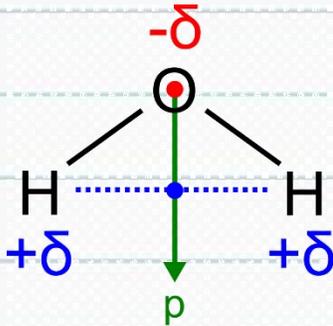
Depende del tipo de átomos que lo conforman: si los átomos son iguales, el enlace será apolar (ya que ningún átomo atrae con más fuerza los electrones).

Si los átomos son diferentes, el enlace estará polarizado hacia el átomo más electronegativo, ya que será el que atraiga el par de electrones con más fuerza.



# Momento dipolar

A medida cuantitativa de la polaridad de una molécula. En presencia de un campo eléctrico, aquellas moléculas polares (es decir, aquellas con un momento dipolar diferente a cero)



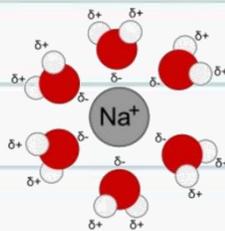
En el caso de moléculas con + 2 átomos, el momento dipolar dependerá de la polaridad de todos sus enlaces y de geometría molecular. La presencia de enlaces polares NO IMPLICA necesariamente que la molécula sea polar

## Interacciones moleculares



Atracción dipolo-dipolo: fuerzas, se producen entre dos o más moléculas polares, por atracción entre cargas parciales (+) y (-)

Atracción ión-dipolo: fuerza entre un ión positivo o negativa y una molécula polar.

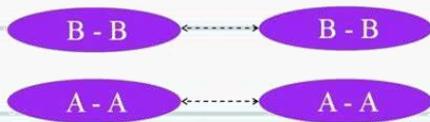


Fuerzas de Van de Waals: Atracciones débiles entre moléculas no polares. Se producen cuando estas moléculas no tienen polos y son inducidas a provocar un desplazamiento momentáneo de los electrones, generando un polo (+) y uno (-), gracias al cual se sienten atraídas



# Fuerzas dipolo dipolo

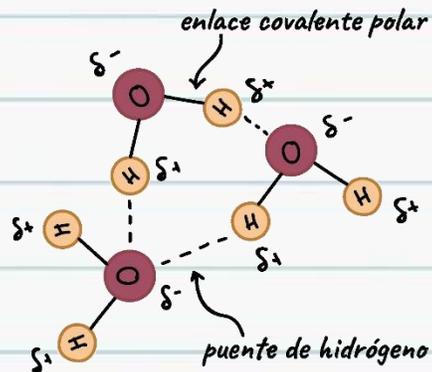
La mayor parte de las moléculas tienen momentos bipolares permanentes como resultado de sus enlaces polares. Cada momento bipolar molecular tiene un extremo positivo y otro negativo.



Estos dipolos temporales solo duran una fracción de segundo y cambian continuamente. Sin embargo, se correlacionan de forma que su fuerza neta es de atracción.

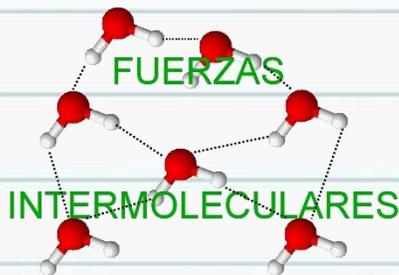
## Puente de hidrógeno

No es un enlace verdadero sino una forma especialmente fuerte de atracción entre dipolos. Un átomo de hidrógeno puede participar en un puente de hidrógeno si está unido a oxígeno, nitrógeno o flúor, porque los enlaces O-H, N-H y F-H están muy polarizados dejando al átomo de hidrógeno con una carga parcial positiva.



# Fuerzas intermoleculares.

. Las atracciones entre moléculas se llaman Fuerzas Intermoleculares. Existen otros tipos de atracciones llamadas intermoleculares que son las fuerzas responsables de la unión de los átomos dentro de una molécula.



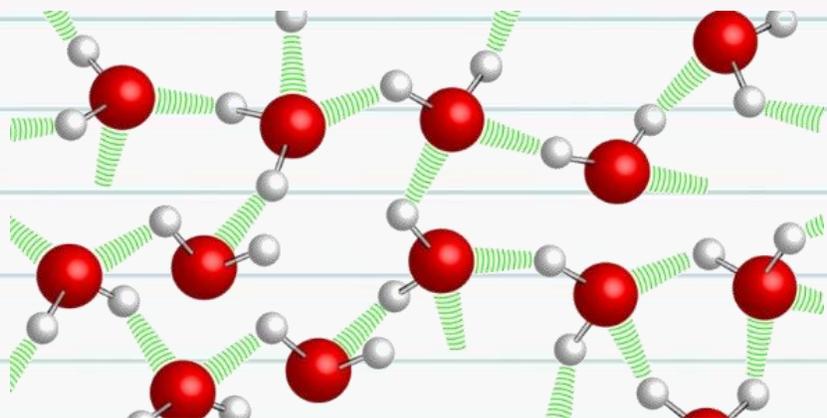
3 tipos de fuerzas de atracción entre moléculas:

Fuerzas de dispersión de London • Fuerzas dipolo - dipolo

Fuerzas de puente de hidrógeno (enlace de hidrógeno)

Otro tipo de fuerza de atracción es la fuerza ion-dipolo, que juega un papel importante en las soluciones

En moléculas con masas y tamaños aproximados, la intensidad de las fuerzas dipolo - dipolo aumenta al incrementarse la polaridad (aumenta el momento dipolar)



## Fuerzas de Vander Waal

fuerzas de atracción intermolecular entre dipolos, sean éstos permanentes o inducidos. Son fuerzas de tipo electrostático que unen a las moléculas tanto polares como apolares.

definen el carácter químico de muchos compuestos orgánicos. También definen la solubilidad de sustancias orgánicas en medios polares y no polares.

Las moléculas tienen movimiento térmico, como cuando están en fase gaseosa o líquida, la fuerza electrostática se reduce significativamente, debido a que las moléculas rotan térmicamente y experimentan las partes repulsiva y atractiva de la fuerza electrostática.

"movimiento térmico aleatorio a temperatura ambiente puede imponerlo o anularlo" (refiriéndose al componente electrostático de la fuerza de van der Waals)

### FUERZAS DE VAN DER WAALS

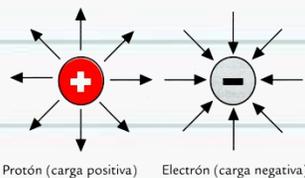


# Fuerzas electrostáticas

Interacción que se da entre cuerpos que poseen carga eléctrica.  
Es una de las cuatro fuerzas fundamentales de la Naturaleza

Dependiendo del signo de las cargas que interaccionan, la fuerza electrostática puede ser atractiva o repulsiva

1861 James Clerk Maxwell unificó todos ellos en las cuatro ecuaciones que llevan su nombre. Por simplicidad, en estas páginas trataremos por separado los fenómenos eléctricos y magnéticos.



Protón (carga positiva)    Electrón (carga negativa)

Mecánica cuántica se desarrolló una ecuación (la ecuación de Schrödinger, equivalente a la segunda ley de Newton en Mecánica Clásica) que permite calcular la función de onda asociada a un electrón

Los fenómenos eléctricos producidos por distribuciones de carga son más complicados de analizar, aunque trataremos algunos sistemas sencillos

Una carga puntual es una carga eléctrica localizada en un punto sin dimensiones. Es una idealización, y resultará muy útil a la hora de estudiar los fenómenos eléctricos

## Fuerzas electrostáticas



Cargas eléctricas iguales se repelen



Cargas eléctricas diferentes se atraen

# Grupos funcionales

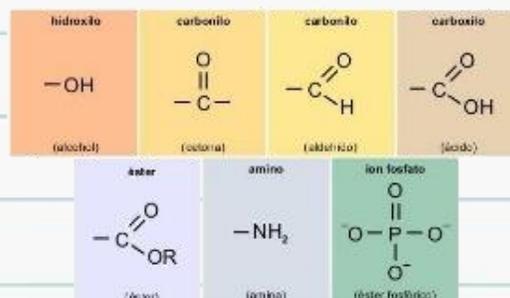
Es un átomo o un arreglo de átomos que siempre reaccionan de una forma determinada; además, es la parte de la molécula responsable de su comportamiento químico ya que le confiere propiedades características.

Los grupos funcionales son motivos químicos o patrones de átomos que muestran una "función" consistente (propiedades y reactividad) independientemente de la molécula exacta en la que se encuentran.

Los grupos carboxilo se encuentran comúnmente en aminoácidos, ácidos grasos y otras biomoléculas. Los carbonilos se encuentran en muchas moléculas biológicas diferentes, que incluyen proteínas, péptidos y carbohidratos.

Un ejemplo de un grupo menos hidrófilo es el grupo carbonilo (C=O), un grupo funcional sin carga, pero polar (que contiene cargas positivas parciales y negativas parciales).

Grupos funcionales de compuestos orgánicos



## Polaridad de los grupos funcionales

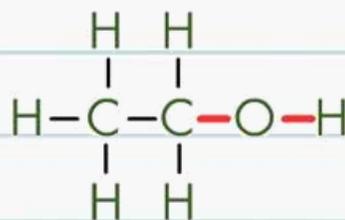
El enlace covalente entre dos átomos puede ser polar o apolar. Esto depende del tipo de átomos que lo conforman: si los átomos son iguales, el enlace será apolar (ya que ningún átomo atrae con más fuerza los electrones



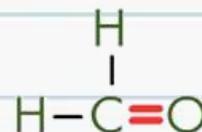
Podemos representar esta polarización del enlace por medio de una flecha, que SIEMPRE apunta al átomo más electronegativo. En el caso del H-F, el momento dipolar ( $\mu$ ) es diferente de cero.

- La polaridad de un enlace aumenta a medida que la electronegatividad de uno de los átomos implicados en un enlace covalente aumenta.
- El momento dipolar del enlace es una medida de la polaridad de un enlace.

La polaridad del enlace se mide mediante su momento dipolar ( $m$ ) que se define como la cantidad de diferencia de carga multiplicada por la longitud del enlace. El símbolo d+ quiere decir una pequeña cantidad de carga positiva y el símbolo d- quiere decir una pequeña cantidad de carga negativa



Etanol



Formaldehído

## BIBLIOGRAFIA:

Universidad del Sureste (2022) Antología para Química Orgánica (página 11-50)  
Universidad Del Sureste