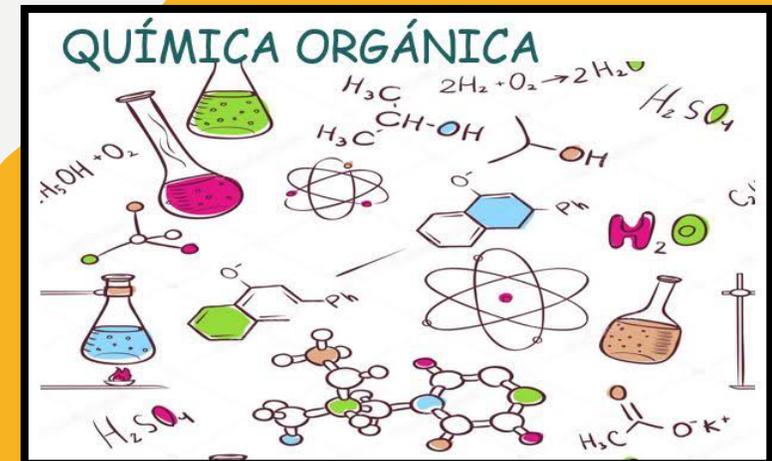


NOMBRE DEL ALUMNO
YURANI GABRIELA SÁNCHEZ RAMO

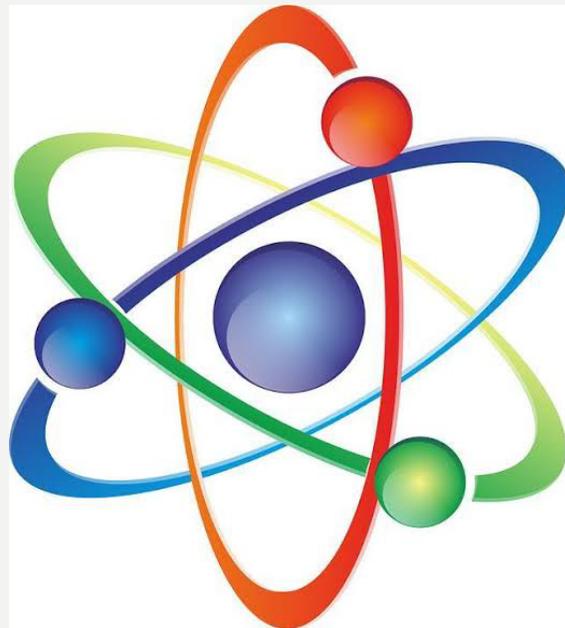
NOMBRE DE LA MATERIA
QUÍMICA ORGÁNICA

NOMBRE DEL MAESTRO
CERVANTES MONROY LUZ ELENA

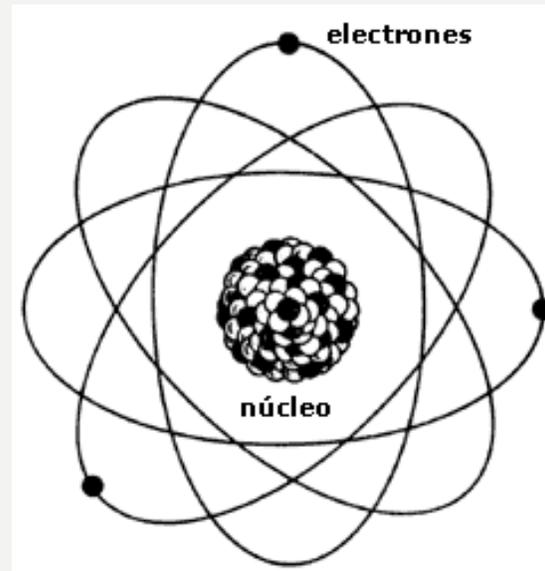


1.1. CONCEPTOS BÁSICOS DE LA ESTRUCTURA ATÓMICA Y MOLECULAR

- El Átomo: Estructura Protón (p^+):• Masa: $1,6 \times 10^{-27} \text{ kg}$ • Gravedad y carga eléctrica Neutrón (n^0):• Masa: $1,6 \times 10^{-27} \text{ kg}$ • Gravedad y carga eléctrica Electrón (e^-):• Masa: $9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$ • Gravedad y carga eléctrica 99,95 % de la masa del átomo está contenida en el núcleo. 99,98% es espacio vacío.

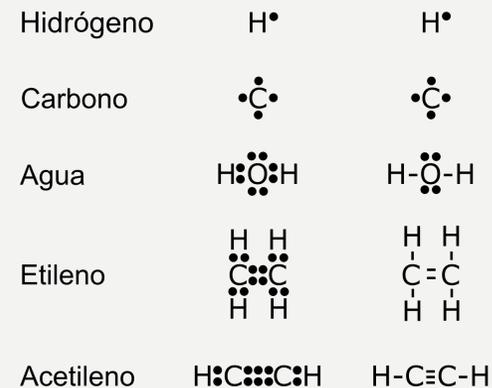


- El Átomo: Estructura• Cada piso del edificio = Nivel de Energía ($N = 1, 2, 3, 4\dots$)• Cada apartamento tiene forma, las formas se llaman Sub-Niveles de Energía (s, p, d, f, g...)• En cada Sub-Nivel de Energía, sólo pueden habitar máximo 2 electrones apareados en spin.• Pero, ¿Cómo se aplica esto a algo que es una onda?• ¿De dónde salen estos niveles y subniveles
- ? Estructura del Átomo:• Cuando está en un átomo, el electrón es onda confinada a un nivel de energía.• Se muestra una región donde el e- es más probable de encontrar. A eso se le llama: Densidad Electrónica.• Cada sub-nivel (cada apartamento) se denomina orbital atómico.



1.2. REPRESENTACION DE MOLECULAS ORGANICAS A PARTIR DE LA ESTRUCTURA DE LEWIS

- En las estructuras de Lewis se arreglan los átomos de manera que tengan una configuración de gas noble (ocho electrones para los elementos del segundo período de la tabla periódica específicamente para los pertenecientes a los grupos principales y un par de electrones para el hidrógeno).
- Los electrones no enlazantes o par solitario de electrones (los que no participan en los enlaces) se representan mediante una línea o con un par de puntos, y deben colocarse siempre alrededor de los átomos a los que pertenece.

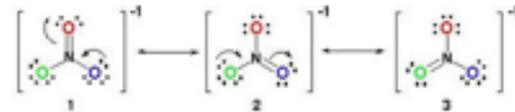


1.2.1. ESTRUCTURA DE LEWIS Y RESONANCIA

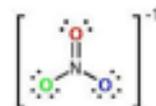
- La resonancia surge cuando se puede dibujar más de una estructura de Lewis válida para una molécula o ion. La estructura electrónica general de la molécula o ion está dada por el promedio ponderado de estas estructuras de resonancia y se denomina híbrido de resonancia.

Resonancia.

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



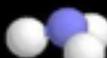
A cada una de ellas se le denomina forma resonante y al conjunto híbrido de resonancia



1.2.2. GEOMETRÍA MOLECULAR A PARTIR DE ESTRUCTURA DE LEWIS

- 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.

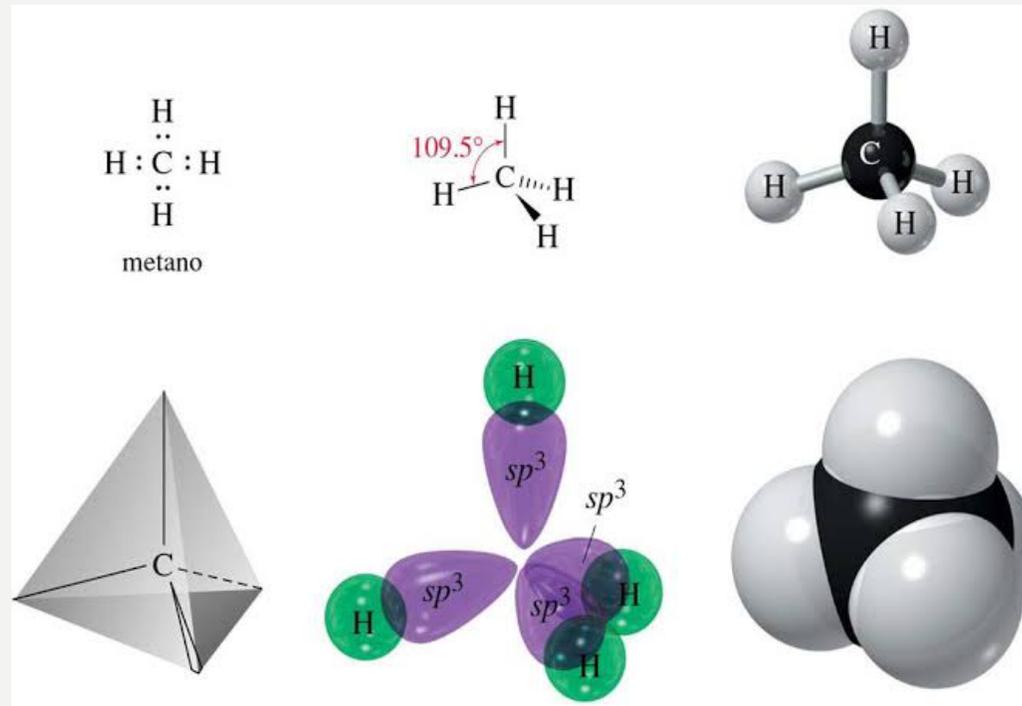
- **Ejemplo 3.7.** Analicemos la molécula de CO_2 . Previamente hemos determinado su estructura de Lewis, la cual es la siguiente:
- Determinemos el número de coordinación del carbono (átomo central): tiene dos átomos unidos y ningún par libre. Por tanto, su número de coordinación es 2, debido a los 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_2 es **LINEAL**. Observa la hibridación del carbono: es **sp**.

Molécula	Estructura de Lewis	Pares enlazantes	Pares no enlazantes	Estructura	Geometría	Modelo molecular
BeCl_2	$\text{Cl}-\text{Be}-\text{Cl}$	2	0	$\text{Cl}-\text{Be}-\text{Cl}$	Lineal	
BF_3	$\text{F}-\text{B}-\text{F}$	3	0	$\text{F}-\text{B}-\text{F}$ (120°)	Triangular	
CH_4	$\text{H}-\text{C}-\text{H}$	4	0	$\text{H}-\text{C}-\text{H}$ (109.5°)	Tetraédrica	
NH_3	$\text{H}-\text{N}-\text{H}$	3	1	$\text{H}-\text{N}-\text{H}$ (109.5°)	Prisma trigonal	
H_2O	$\text{H}-\text{O}-\text{H}$	2	2	$\text{H}-\text{O}-\text{H}$ (109.5°)	Angular	

1.2.3. ESTRUCTURA Y PROPIEDADES DE LAS MOLÉCULAS

- La estructura de una molécula depende de tres factores: el tipo y número de átomos que la constituyen, la distribución espacial de los núcleos y la conectividad entre ellos. Una modificación en una de estas tres variables provoca cambios en las propiedades físicas, químicas y biológicas de la molécula. Así, los isómeros geométricos difieren en sus puntos de fusión y reactividad, mientras que isómeros conformacionales (confórmeros) presentan actividad biológica que puede variar enormemente de un isómero a otro. De acuerdo con un paradigma fundamental de la Química, la estructura molecular es una propiedad inherente y es casi imposible explicar y predecir el resultado de una reacción química sin tener una noción de ella.

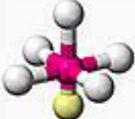
- existen moléculas flexibles donde el rompimiento y la formación de enlaces requieren una cantidad mínima de energía. Por ejemplo, el bulvaleno, $C_{10}H_{10}$
- La existencia de estas moléculas demuestra la necesidad de visualizar al modelo de estructura molecular como un modelo dinámico en continua evolución. Además, debe tenerse en mente que el concepto de estructura molecular no depende únicamente de un modelo teórico, si no de las condiciones experimentales utilizadas para determinar las posiciones de los núcleos.



1.2.4. MODELO DE REPULSIÓN DEL PAR ELECTRÓNICO DE LA CAPA DE VALENCIA

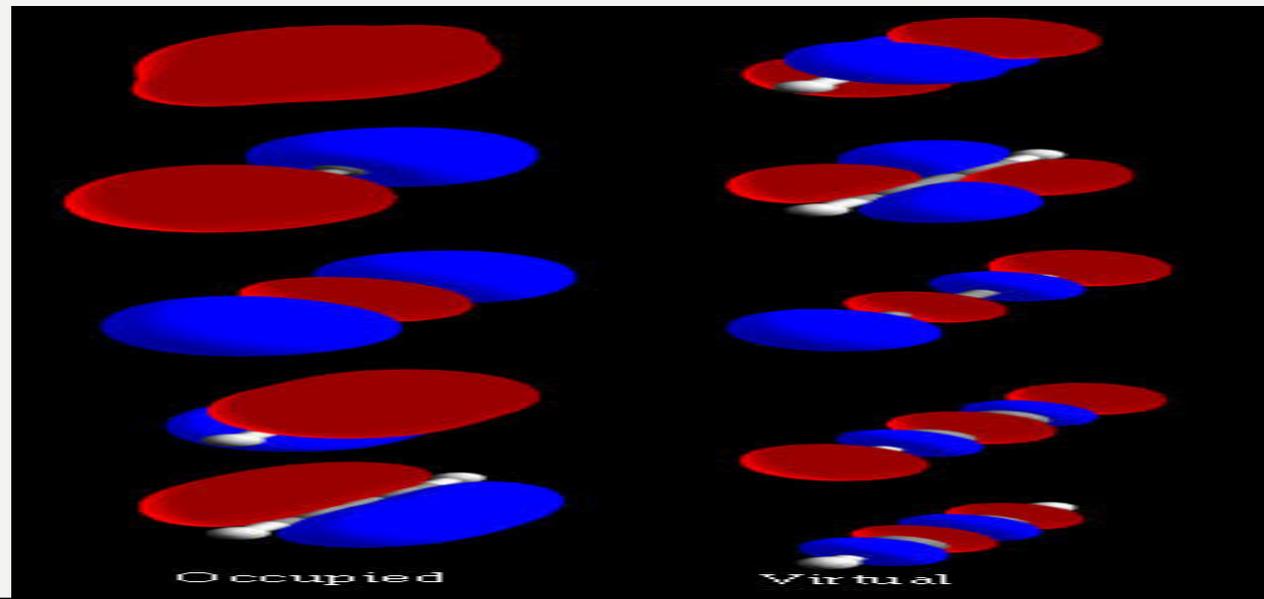
- El modelo de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia parte de una idea intuitiva y sencilla: dado que los electrones son cargas negativas y se repelen entre sí, la geometría de la especie química considerada será aquella que permita minimizar las repulsiones entre los pares electrónicos que se hallan en torno al átomo central, es decir, los electrones de la capa de valencia del átomo central. Estos pares electrónicos pueden ser tanto pares pertenecientes a un enlace químico con otro átomo (pares enlazantes) como pares libres (pares no enlazantes). Así, estos pares electrónicos en torno al átomo central se colocarán lo más separados posible para que la repulsión entre ellos sea mínima.

- Cabe destacar, no obstante, que los pares no enlazantes causan mayores repulsiones a los pares vecinos que los pares enlazantes, motivo por el cual algunas moléculas con pares libres en torno al átomo central, como el amoníaco o el agua, presentan ligeras variaciones en el ángulo de enlace esperado. Puesto que nos basamos en la capa de valencia del átomo central, el modelo RPECV es útil únicamente para la predicción de la geometría de moléculas covalentes sencillas, formadas por un átomo central enlazado a algunos átomos periféricos.
- Esta teoría tiene relación con la de la hibridación de orbitales porque también esta última tiene implicaciones geométricas. Así por ejemplo, la hibridación sp^3 supone la formación de un tetraedro porque los cuatro enlaces híbridos sp^3 tienden a colocarse lo más lejos posible angularmente unos de otros.

AB_5E_1	Pirámide cuadrada			ClF_5, BrF_5
AB_6E_0	Octaédrica			SF_6
AB_6E_1	Pirámide pentagonal			$XeOF_5^-, IOF_5^{2-10}$
AB_7E_0	Bipirámide pentagonal			IF_7

1.2.5. MODELO DEL ORBITAL MOLECULAR

- Los orbitales moleculares se construyen habitualmente por [combinación lineal](#) de orbitales atómicos centrados en cada átomo de la molécula. Utilizando los métodos de cálculo de la estructura electrónica, como por ejemplo, el método de [Hartree-Fock](#) o el de los campos autoconsistente (*self-consistent field*, SCF), se pueden obtener de forma cuantitativa.



1.3.ENLACES EXISTENTES EN COMPUESTO ORGÁNICOS

- **Enlace simple** Es la manera más sencilla en la que el carbono comparte sus cuatro electrones. Los enlaces se colocan apuntando a los cuatro vértices de un tetraedro regular, estando el carbono en el baricentro de dicho tetraedro. Se dice que el carbono actúa de manera tetragonal.

El ejemplo más simple lo representa el metano, en el que un átomo de carbono comparte cada uno de sus cuatro electrones exteriores con un átomo de hidrógeno, de modo que tanto el carbono como cada uno de los cuatro hidrógenos completan su última capa electrónica.

A la derecha tienes una simulación en la que puedes girar la molécula arrastrando mientras pulsas el botón izquierdo del ratón, y ampliarla arrastrando mientras pulsas el botón derecho.

- **Enlace doble**

- El carbono no tiene por qué formar los cuatro enlaces con cuatro átomos distintos. Puede darse el caso de que dos de esos enlaces los forme con un mismo átomo. Hablamos entonces de un enlace doble. Los dos electrones que le quedan al carbono se enlazan con otros dos átomos mediante enlaces simples. En este caso, el enlace doble y los dos simples apuntan a los vértices de un triángulo casi equilátero. Se dice que el carbono actúa de forma trigonal.

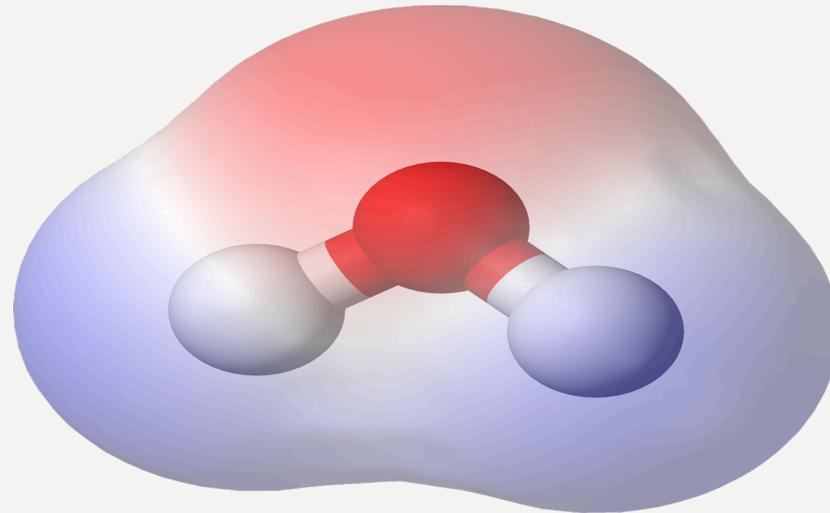
El ejemplo más simple es el etileno, en el que los dos carbonos comparten dos electrones entre sí y los otros dos que les quedan a cada uno los comparten con dos átomos de hidrógeno. La estructura es trigonal y plana.

- **Enlace triple** Por último, puede el carbono formar tres enlaces con un mismo átomo, y el cuarto con un átomo distinto. Se habla entonces de un enlace triple. En este caso la molécula es lineal, y decimos que el carbono actúa de forma lineal.

El ejemplo más simple de esto es el acetileno, en el que dos carbonos se unen mediante un enlace triple y el electrón que les queda a cada uno lo comparten con un átomo de hidrógeno. Por supuesto, la molécula es lineal. También puede el carbono formar el enlace triple con otros elementos como el nitrógeno.

1.4.POLARIDAD DE LAS MOLÉCULAS

- Tal como sucede con los enlaces, **las moléculas también pueden ser polares**. En una molécula polar, la densidad de los electrones se distribuye de forma desigual a lo largo de la molécula, lo que resulta en regiones de carga parcialmente negativa y regiones de carga parcialmente positiva.
- La **polaridad** es una 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. El enlace covalente entre dos átomos puede ser polar o apolar.



1.4.1 MOMENTO DIPOLAR

- La magnitud de ese **dipolo** viene definida por lo que se conoce como **momento dipolar**, y es el producto de la carga fraccional presente sobre cada átomo por la distancia que las separa. La unidad de **momento dipolar** es el debye; $1 \text{ D} = 3,34 \times 10^{-30} \text{ Culombio} \times \text{m}$.
- La separación de cargas en un enlace covalente es tanto mayor cuanto mayor sea la diferencia de electronegatividades entre los átomos que lo forman. Esto quiere decir que un enlace entre dos átomos de **C**, o entre un **C** y un **H** tiene una distribución prácticamente homogénea de los electrones, esto es, de la carga, mientras que un enlace **C-O** tiene la nube electrónica más desplazada hacia el oxígeno, al ser este elemento más electronegativo que el carbono. Así, en un enlace sencillo **C-O** el oxígeno tiene aproximadamente un 0,2 de carga negativa (y el **C** un 0,2 de carga positiva), mientras que en un enlace **H-O** la carga sobre cada átomo es del orden de 0,4; evidentemente, también en este caso el exceso de carga negativa corresponde al átomo de oxígeno.

1.5. INTERACCIONES MOLECULARES

- Las interacciones moleculares son fuerzas atractivas o repulsivas entre moléculas y entre átomos no enlazados. Las interacciones moleculares son importantes en diversos campos, como el estudio del plegamiento de proteínas, el diseño de fármacos, la ciencia de materiales, el desarrollo de sensores, la nanotecnología, los procesos de separación y la investigación sobre los orígenes de la vida. A las interacciones moleculares también se las conoce como 'interacciones no covalentes' o 'interacciones intermoleculares'.

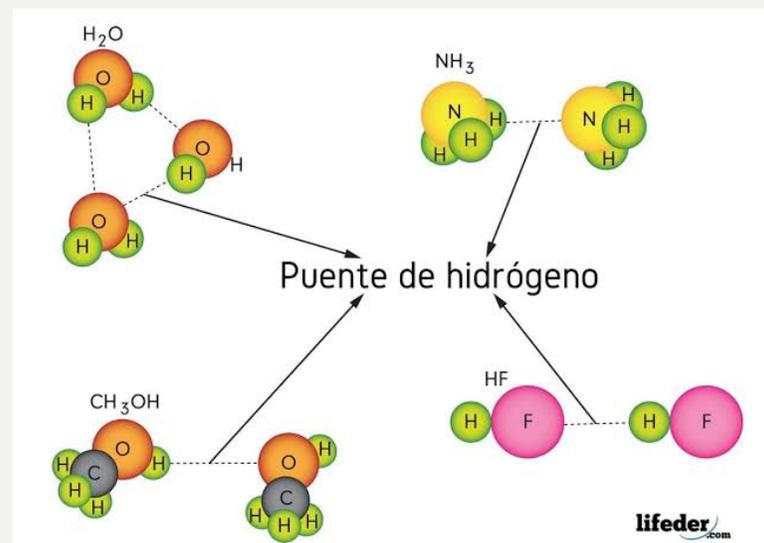
- Las interacciones moleculares no son enlaces. Los enlaces mantienen los átomos juntos *en* las moléculas. Una molécula es un conjunto de átomos que se asocia lo suficientemente fuerte como para no disociarse o perder su estructura cuando interactúa con su entorno. A temperatura ambiente, dos átomos de nitrógeno forman un enlace (N_2). Dos átomos de argón no. Los enlaces se rompen y se forman durante las reacciones químicas. En la reacción química en la que el fuego consume un trozo de papel, los enlaces de la celulosa se rompen mientras se forman enlaces de dióxido de carbono y agua. La entalpía de enlace es una magnitud termodinámica que cuantifica la energía total contenida en un enlace químico — es la energía necesaria para romper o formar enlaces. Las entalpías de enlace suelen ser del orden de 100 kcal/mol (400 kJ/mol), que es mucho mayor que RT a temperatura ambiente (donde R es la constante de los gases y T es la temperatura); los enlaces no se rompen a temperatura ambiente.

1.5.1.FUERZAS DIPOLO-DIPOLO

- Una molécula es un **dipolo** cuando existe una distribución asimétrica de los electrones debido a que la molécula está formada por átomos de distinta electronegatividad. Como consecuencia de ello, los electrones se encuentran preferentemente en las proximidades del átomo más electronegativo.
- las sustancias en las cuales las interacciones **dipolo dipolo** afectan a las propiedades físicas son el fluoruro de bromo BrF, y el dióxido de azufre SO₂, además de otras muchas moléculas con puentes de hidrógeno, que son un tipo especial de interacción **dipolo-dipolo**.

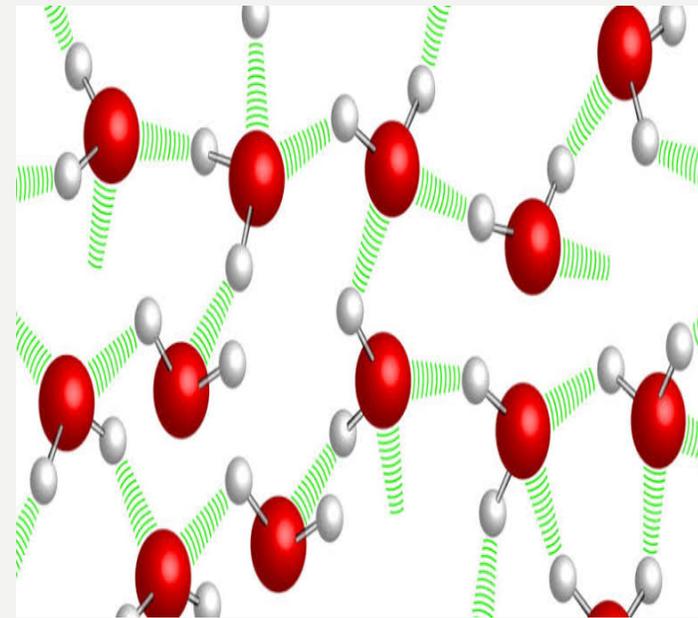
1.5.2. PUENTE DE HIDRÓGENO

- El puente de hidrógeno puede vincular distintas moléculas e incluso sectores diferentes de una misma molécula. El átomo de hidrógeno, que cuenta con carga positiva, se conoce como **átomo donante**, mientras que el átomo de oxígeno, fluor o nitrógeno es el **átomo aceptor** del enlace.
- El puente de hidrógeno es la fuerza eminentemente electrostática atractiva entre un átomo electronegativo y un átomo de hidrógeno unido covalentemente a otro átomo electronegativo.



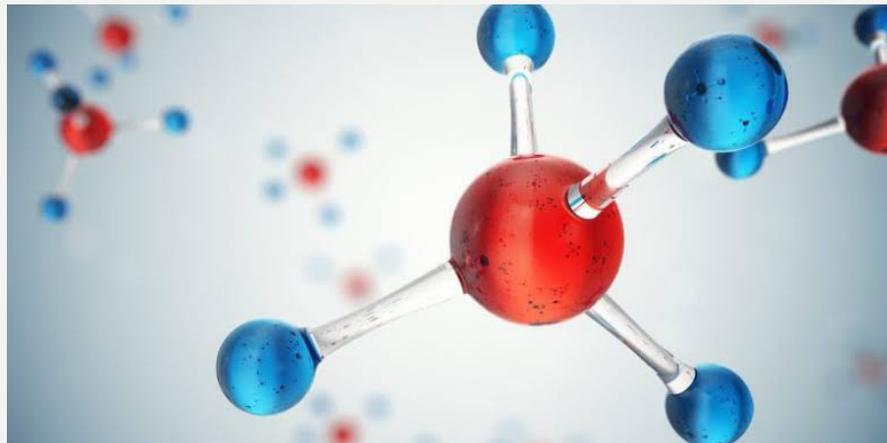
1.5.3. FUERZAS INTERMOLECULARES

- Fuerza intermolecular se refiere a las interacciones que existen entre las moléculas conforme a su naturaleza. Generalmente, la clasificación es hecha de acuerdo a la polaridad de las moléculas que están interaccionando, o sobre la base de la naturaleza de las moléculas, de los elementos que la conforman.
- ¿Cuáles son los tipos de fuerzas intermoleculares?
- PORTADA]
- **FUERZAS INTERMOLECULARES.**
- **FUERZAS DE POLARIDAD (DIPOLO-DIPOLO)**
- **FUERZAS ELECTROSTÁTICAS (IÓN-IÓN)**
- **FUERZAS IÓN-DIPOLO.**
- **FUERZAS IÓN-DIPOLO INDUCIDO.**
- **INTERACCIONES HIDROFÓBICAS.**
- **FUERZAS DE VAN DER WAALS.**



1.5.4.FUERZAS DE VANDER WAALS

- En fisicoquímica, las fuerzas de Van der Waals o interacciones de Van der Waals son las fuerzas atractivas o repulsivas entre moléculas distintas a aquellas debidas a un enlace intermolecular o a la interacción electrostática de iones con moléculas neutras. El término incluye: La fuerza entre dos dipolos permanentes.
- Fórmula
- = fuerzas de Van der Waals= radios de los cuerpos esféricos= constante de Hamaker= distancia entre las superficies



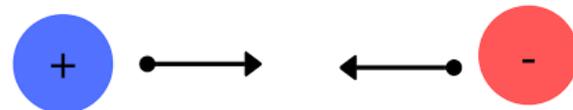
1.6.FUERZAS ELECTROSTÁTICA

- La ley de Coulomb, nombrada en reconocimiento del físico francés Charles-Augustin de Coulomb, que enunció en 1785 y forma la base de la electrostática, puede expresarse como: La constante de proporcionalidad depende de la constante dieléctrica del medio en el que se encuentran las cargas.
-
- Fórmula
- = fuerza eléctrica = Constante de Coulomb = cargas = distancia de separación

Fuerzas electrostáticas



Cargas eléctricas iguales se repelen



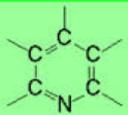
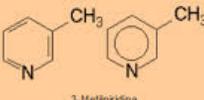
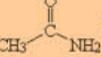
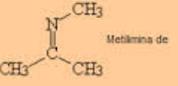
Cargas eléctricas diferentes se atraen

1.6.1. GRUPOS FUNCIONALES

- En química, un grupo funcional es un átomo o conjunto de átomos unido a una cadena carbonada, representada en la fórmula general por R para los compuestos alifáticos y como Ar para los compuestos aromáticos y que son responsables de la reactividad y propiedades químicas de los compuestos orgánicos.
- ¿ Cuáles son los 4 grupos funcionales?

• Grupos funcionales

- Alcohol.
- Aldehído.
- Cetona.
- Ácido. carboxílico.
- Éster.
- Amina.
- Amida

Clase	Grupo funcional	Ejemplo	Clase	Grupo funcional	Ejemplo
aminas primarias	-NH ₂	CH ₃ -NH ₂ Metilamina	(hetero) aromáticos		 3-Metilpiridina
aminas secundarias	-NH-	(CH ₃) ₂ NH Dimetilamina	nitrilos	-CN	CH ₃ CN Acetonitrilo
aminas terciarias		(CH ₃) ₃ N Trimetilamina	amidas		 Acetamida
iminas		 Metilamina de la propanona	nitroderivados	-NO ₂	CH ₃ NO ₂ Nitrometano

1.6.2. POLARIDAD DE LOS GRUPOS FUNCIONALES

- La **polaridad** es una característica de un gran número de moléculas orgánicas, como las proteínas y los ácidos nucleicos, que les permite interaccionar con otras moléculas y con el agua, que también es una molécula polar. Por ejemplo, la orientación de los **grupos** químicos **polares** C=O.
- ¿Cómo saber la polaridad de los elementos?
-
- Para determinar la **polaridad** o apolaridad de las moléculas covalentes debemos tener en cuenta tanto la diferencia de electronegatividad de los enlaces como la geometría, para determinar si los momentos dipolares se anulan o no se anulan por la disposición geométrica de los enlaces (por ejemplo, en el agua