

Nutrición.



QUÍMICA ORGÁNICA.

SUPER NOTAS.

1°A

Alumna: KAROL FIGUEROA MORALES
Maestra: LUZ ELENA CERVANTES MONROY

UNIDAD UNO.



Introducción a la química Orgánica

1.1 Conceptos básicos de la estructura atómica y molecular.

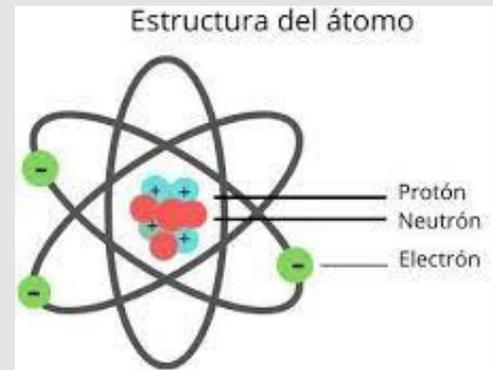
Teoría Atómica

En 1808, John Dalton estableció las hipótesis sobre la teoría atómica:

- Los elementos están formados por partículas pequeñas llamadas átomos.
- Los compuestos están formados por átomos de más de un elemento en una relación que es un número entero o una fracción sencilla.
- Una reacción química consiste en la separación, combinación o reordenamiento de los átomos.

Átomo.

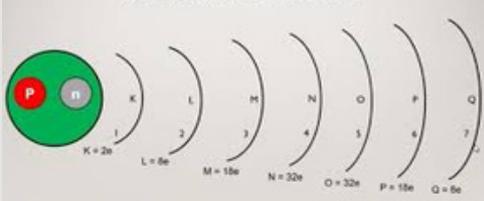
Unidad básica que puede intervenir en una combinación química. Formado por partículas subatómicas, son importantes los electrones, los protones y los neutrones.



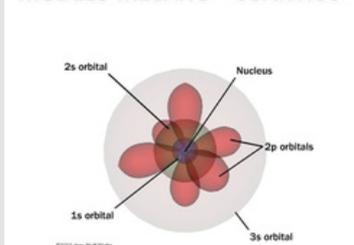
Modelos atómicos:

- Bohr propuso un modelo planetario para explicar la estructura atómica.
- A finales de los 1920, Schrödinger y Heisenberg propusieron un modelo mecánico cuántico.

MODELO ATÓMICO DE BOHR



MODELO MECANO – CUÁNTICO



Configuración electrónica. Disposición de los electrones en los diversos orbitales atómicos se conoce como configuración electrónica.

Configuraciones electrónicas con kernell:

Para representar las configuraciones electrónicas de kernell de los elementos químicos periodo dos (renglón dos) se utiliza el gas noble del periodo uno (renglón uno).

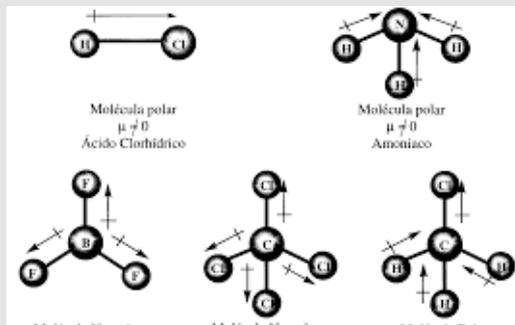
Niveles

1	1s ²
2	2s ² 2p ⁶
3	3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰
4	4s ² 4p ⁶ 4d ¹⁰ 4f ¹⁴
5	5s ² 5p ⁶ 5d ¹⁰ 5f ¹⁴
6	6s ² 6p ⁶ 6d ¹⁰ 6f ¹⁴
7	7s ² 7p ⁶ 7d ¹⁰ 7f ¹⁴

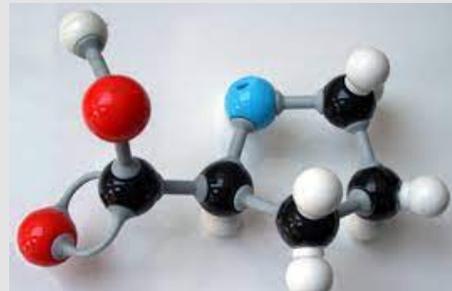
MOLECULAR

En el siglo XIX muchos químicos ya construían modelos a escala para entender mejor la estructura de la molécula. Nosotros podemos tener una mejor apreciación de las características que afectan a la estructura y a la reactividad cuando examinamos la forma tridimensional de un modelo molecular. Los modelos más útiles son (se utiliza como ejemplo el metano, y se inicia con un modelo de alambre pero con los enlaces más gruesos):

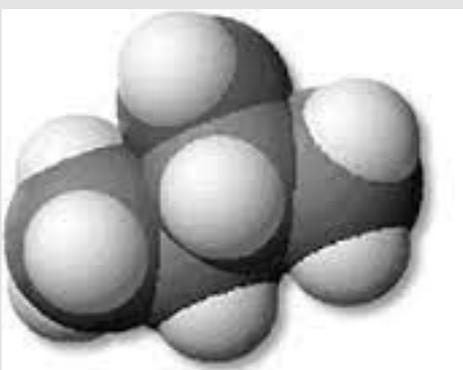
- **Modelo de esqueleto (alambres):** Este modelo muestra los enlaces que conectan los distintos átomos de una molécula, pero no los propios átomos.



- **Modelo de barras y esferas:** En estos modelos se dedica la misma atención a los átomos que a los enlaces.



- **Modelo compacto:** Este modelo representa el extremo opuesto, en tanto que, destaca el volumen ocupado por cada átomo a costa de una clara representación de los enlaces, son más utilizados en los casos en que se desea examinar la forma global de la molécula y para valorar cómo están de cerca dos átomos próximos no enlazados.



1.2 Representación de moléculas orgánicas a partir de estructuras de Lewis

1.2.1 Estructuras de Lewis y resonancia.

Estructura representativa de los electrones de valencia y los enlaces covalentes en una molécula o ion que sirve para tener una idea de su estructura molecular. Puede argumentarse sobre la reactividad de un compuesto, su estabilidad, el cómo y qué mecanismo seguirá la molécula cuando reaccione.

Hidrógeno	H [•]	H [•]
Carbono	$\cdot\overset{\cdot}{\text{C}}\cdot$	$\cdot\overset{\cdot}{\text{C}}\cdot$
Agua	$\text{H}:\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{O}}}\cdot\text{H}$	$\text{H}-\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{O}}}-\text{H}$
Etileno	$\begin{array}{cc} \text{H} & \text{H} \\ & \\ \text{C} & \text{C} \\ & \\ \text{H} & \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{cc} \text{H} & \text{H} \\ & \\ \text{C} & = & \text{C} \\ & \\ \text{H} & \text{H} \end{array}$
Acetileno	$\text{H}:\text{C}\equiv\text{C}:\text{H}$	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$

Fórmula matemática: $C = N - D$

C: electrones compartidos.

N: electrones necesarios.

D: electrones disponibles.

GRUPO	IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
# electrones de Valencia	1	2	3	4	5	6	7	8
H	H [•]	Be ^{••}	B ^{•••}	C ^{••••}	N ^{•••••}	O ^{••••••}	F ^{•••••••}	Ne ^{••••••••}
Li	Li [•]	Mg ^{••}	Al ^{•••}	Si ^{••••}	P ^{•••••}	S ^{••••••}	Cl ^{•••••••}	Ar ^{••••••••}
Na	Na [•]	Ca ^{••}	Ga ^{•••}	Ge ^{••••}	As ^{•••••}	Se ^{••••••}	Br ^{•••••••}	Kr ^{••••••••}
K	K [•]	Sr ^{••}	In ^{•••}	Sn ^{••••}	Sb ^{•••••}	Te ^{••~••••}	I ^{••••~••••}	Xe ^{••••~••••}
Rb	Rb [•]	Ba ^{••}	Tl ^{•••}	Pb ^{••~•••}	Bi ^{••~••~••}	Po ^{••~••~••}	At ^{••~••~••}	Rn ^{••~••~••}

Dónde colocar los átomos menos electronegativos: ocupan los centros.

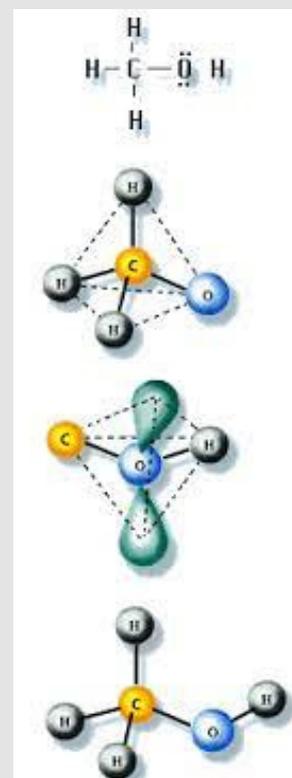
Simetría y las cargas formales: originar estructuras moleculares lo más simétricas posibles.

Limitaciones en la regla del octeto: D = 1×3 (un átomo de aluminio) + 7×3 (tres átomos de flúor) = 24 electrones (ejemplo).

1.2.2 Geometría molecular a partir de estructuras de Lewis.

La geometría molecular o estructura molecular es la distribución espacial de los átomos alrededor de un átomo central. Forman enlaces (simples, dobles o triples).

Enlace de valencia (TEV) y la de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV).



Molécula	Estructura de Lewis	Pares enlazantes	Pares no enlazantes	Estructura	Geometría	Modelo molecular
BeCl_2	$\text{Cl} \text{---} \text{Be} \text{---} \text{Cl}$	2	0	$\text{Cl} \text{---} \text{Be} \text{---} \text{Cl}$	Lineal	
BF_3	$\text{F} \text{---} \text{B} \text{---} \text{F}$	3	0	$\text{F} \text{---} \text{B} \text{---} \text{F}$ 120°	Triangular	
CH_4	$\text{H} \text{---} \text{C} \text{---} \text{H}$	4	0	$\text{H} \text{---} \text{C} \text{---} \text{H}$ $109,5^\circ$	Tetraédrica	
NH_3	$\text{H} \text{---} \text{N} \text{---} \text{H}$	3	1	$\text{H} \text{---} \text{N} \text{---} \text{H}$ $109,5^\circ$	Pirámide trigonal	
H_2O	$\text{H} \text{---} \text{O} \text{---} \text{H}$	2	2	$\text{H} \text{---} \text{O} \text{---} \text{H}$ $109,5^\circ$	Angular	

Tipos:

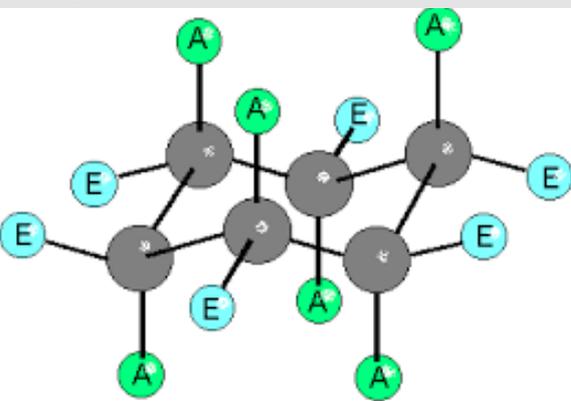
-Lineal: Todos los enlaces covalentes son direccionales, por lo que el enlace A-B es lineal.

-Tetraédrica: se transforma en una geometría angular.

-Bipirámide trigonal: sus átomos centrales tienen hibridación sp^3 , según la TEV (109°).

-Posiciones axial y ecuatorial: Los puntos verdes que componen la base triangular están en posiciones ecuatoriales, mientras que los dos en los extremos superiores e inferiores, en posiciones axiales.

Ciclohexano



Ejemplos:

- Geometría lineal: Etileno, $\text{H}_2\text{C} \equiv \text{CH}_2$
- Geometría angular: El agua
- Plana trigonal: Trifluoruro de bromo, BF_3
- Tetraédrica: Gas metano, CH_4
- Pirámide trigonal: Amoníaco, NH_3 .
- Bipirámide trigonal: Pentafluoruro de fósforo, PF_5 .
- Oscilante Tetrafluoruro de azufre, SF_4 .
- Forma de T -Tricloruro de yodo, ICl_3 .

-Oscilante y forma de T: se sustituyera uno o más de sus átomos por pares libres de electrones.

-Octaédrica: Este tipo de geometría corresponde a los compuestos AB_6 .



1.2.3 Estructura y propiedades de las moléculas

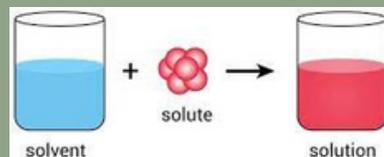
Punto de ebullición:
Líquido a gas.



Punto de fusión:
Sólido a líquido.



Solubilidad.
Afectar a los puntos de ebullición y de fusión.



Polaridad sobre la solubilidad:

- Un soluto polar con un disolvente polar.
- Un soluto polar con un disolvente no polar.
- Un soluto no polar con un disolvente no polar.
- Un soluto no polar con un disolvente polar.

Acidez en las moléculas orgánicas.

Un 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^-).

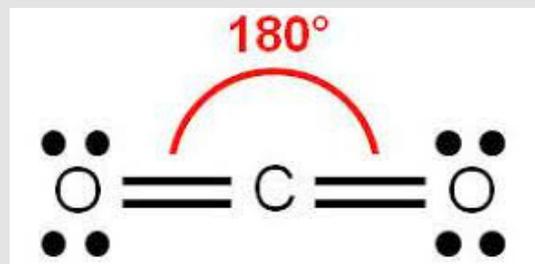
Acidez en las moléculas orgánicas.

En 1923 Brönsted y Löwry definieron un ácido como una sustancia capaz de ceder protones y una base como una sustancia capaz de aceptar protones.

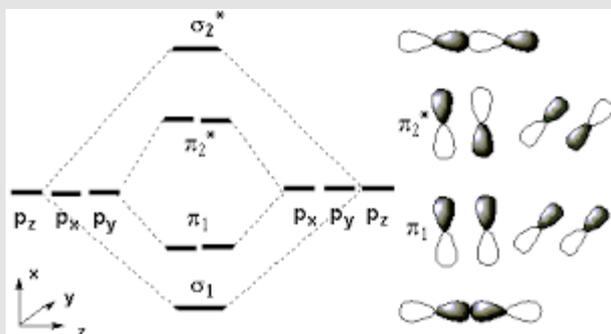
1.2.4 Modelo de repulsión del par electrónico de la capa de valencia.

Modelo RPECV: Por R. J. Gillespie y R. S. Nyholm en 1957.

Predecir la estructura de cualquier molécula de fórmula general: $AX_n S_m$ A = átomo central.



1.2.5 Modelo del orbital molecular.

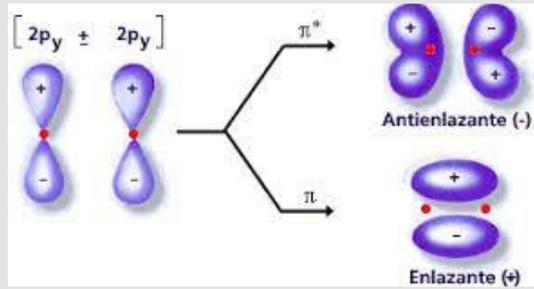


Modelo del Orbital Molecular (OM):
Considera que los electrones de una molécula ocupan orbitales moleculares.

Tipos de orbitales moleculares:

O.M. Enlazante

Energía menor que el orbital de partida
Interferencia constructiva
Genera Enlace Químico.



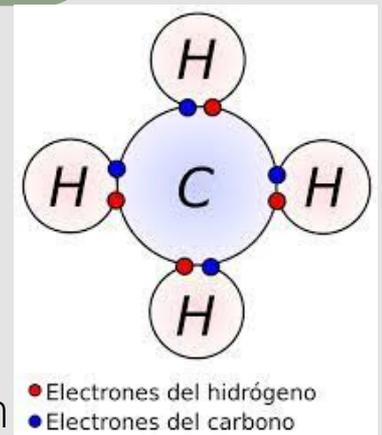
O.M. Antienlazante

Interferencia destructiva
Energía mayor que el orbital de partida
Orbital Antienlazante (densidad electrónica baja entre núcleos).

1.3 Tipos de enlaces existentes en compuestos orgánicos: Caracterización de cada uno de ellos de acuerdo a: Longitud de enlace, Angulo de enlace, energía de enlace.

Enlaces más débiles que el enlace covalente.

Enlace covalente: Unión que explica el mantenimiento de la unidad estructural de un compuesto orgánico.

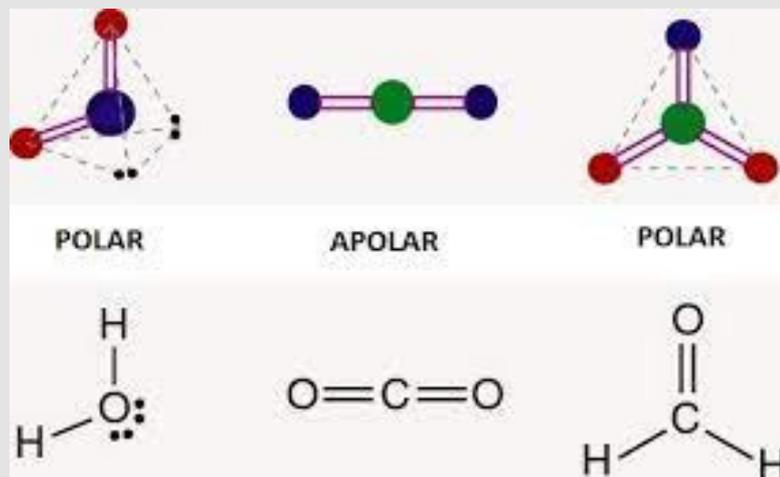


Tres tipos principales de interacciones intermoleculares: las fuerzas entre dipolos de las moléculas polares, las fuerzas de London que afectan a todas las moléculas, y los puentes de hidrógeno que atraen moléculas que tienen grupos OH y NH.

1.4 Polaridad de las moléculas.

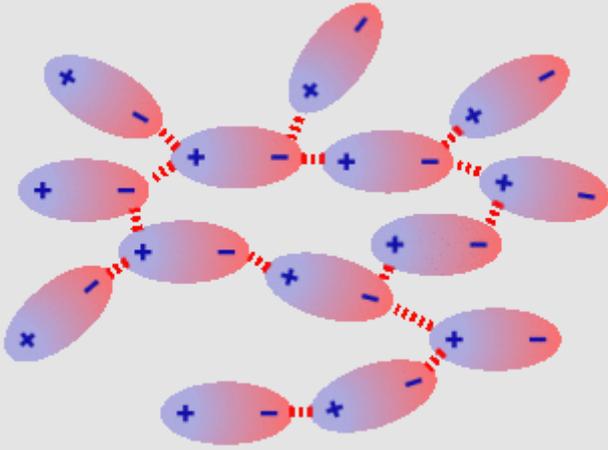
Propiedad de las moléculas que representa la separación de las cargas eléctricas dentro de la molécula, según el número y tipo de enlaces que posea.

El enlace covalente entre dos átomos puede ser polar o apolar.



1.4.1 Momento dipolar.

Medida cuantitativa de la polaridad de una molécula.



1.5.1. Fuerzas dipolo-dipolo.

Cada momento bipolar molecular tiene un extremo positivo y otro negativo.

Las fuerzas entre dipolo-dipolo son fuerzas de atracción intermolecular.

1.5 Interacciones moleculares.

- Atracción dipolo-dipolo.

Atracción entre cargas parciales positivas y negativas.

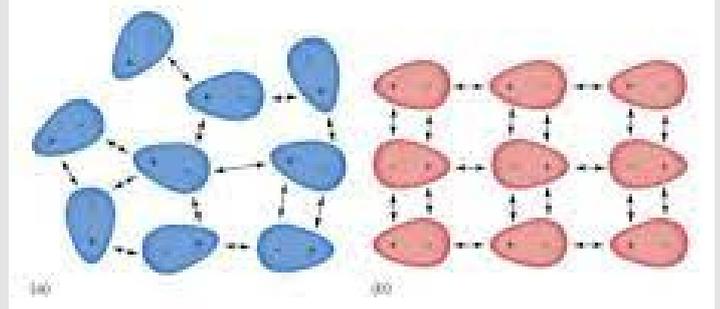
- Atracción ión-dipolo.

Fuerza entre un ión positivo o negativa y una molécula polar.

- Fuerzas de Van de Waals (fuerzas de London).

Atracciones débiles entre moléculas no polares.

Fuerzas dipolo-dipolo

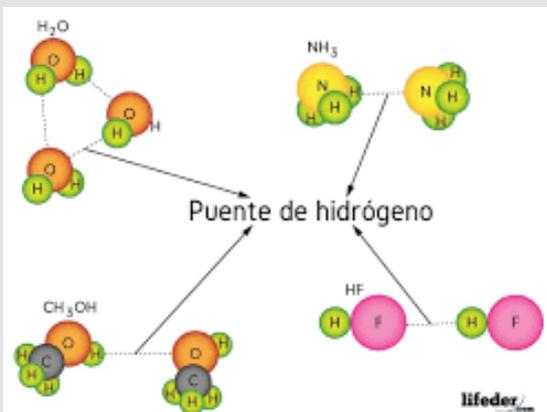


1.5.2 Puente de hidrógeno.

-No es un enlace verdadero sino una forma especialmente fuerte de atracción entre dipolos.

-Tiene una gran afinidad hacia electrones no compartidos.

-Forma agregados intermoleculares.



1.5.3 Fuerzas intermoleculares.

Atracciones entre moléculas.

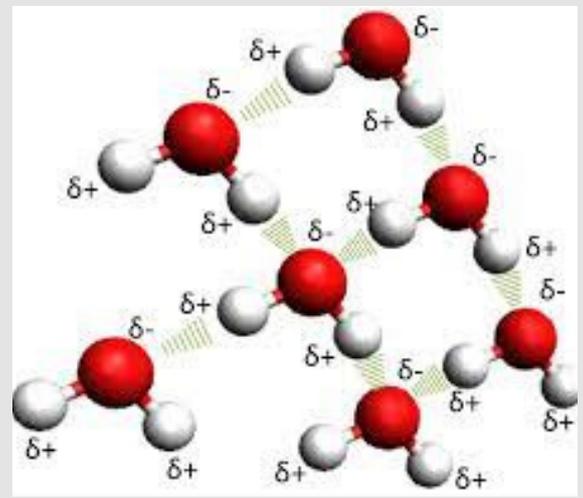
-El orden de magnitud relativa de las fuerzas intermoleculares es: Enlace de hidrógeno > dipolo – dipolo > dispersión de London.

Polarizabilidad es la medida de la capacidad de distorsión de la nube electrónica.

1.5.4 Fuerzas de Vander Waals.

Fuerzas de atracción intermolecular entre dipolos, sean éstos permanentes o inducidos.

- Fuerzas de tipo electrostático.
- Sinónimo para la totalidad de las fuerzas intermoleculares.



1.6 Fuerzas electrostáticas.

$$e = -1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

Interacción que se da entre cuerpos que poseen carga eléctrica.

-Fundamental de la naturaleza.

-La carga del electrón:

1.6.1. Grupos funcionales.

-Es un átomo o un arreglo de átomos que siempre reaccionan de una forma determinada.

-Los grupos funcionales se pueden clasificar como hidrofóbicos o hidrofílicos por sus características de carga y polaridad.

Grupo funcional	Estructura	Propiedades
Hidroxilo		Polar
Metilo		No polar
Carbonilo		Polar
Carboxilo		Con carga en sistemas biológicos.

Grupo funcional	Estructura	Propiedades
Amino		Con carga en el pH de la mayoría de los sistemas biológicos. Dado que los grupos amino pueden eliminar de la solución, son considerados básicos.
Fosfato		Con carga en el pH de la mayoría de los sistemas biológicos. Dado que los grupos fosfato pueden liberar H en la solución, se consideran ácidos.
Sulfhidrilo		Polar

Tabla modificada de: OpenStax Biología.

1.6.2. Polaridad de los grupos funcionales.

-Si los átomos son iguales, el enlace será apolar.

-Si los átomos son diferentes, el enlace estará polarizado hacia el átomo más electronegativo.

-La mayor parte de los enlaces covalentes están formados por dos átomos diferentes.

BIBLIOGRAFÍA:

https://medicina.usac.edu.gt/quimica/hidrocar/introduccion/Modelos_Moleculares.htm

Universidad del Sureste (2022)

Antología de química orgánica.