



Mi Universidad

Súper nota

Roberta Jocelyn Aguilar García

“ENLACE, ESTRUCTURA Y PROPIEDADES EN COMPUESTOS QUÍMICOS ORGÁNICOS”

Unidad I

QUÍMICA ORGÁNICA

Luz Elena Cervantes Monroy

Licenciatura en Nutrición

Primer Cuatrimestre

UNIDAD I INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA ORGÁNICA

CONCEPTOS BASICOS DE LA ESTRUCTURA ATÓMICA Y MOLECULAR

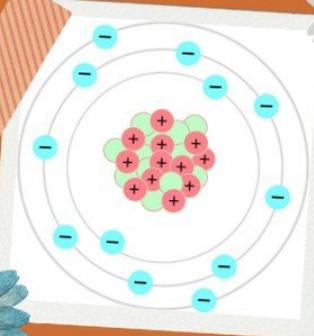
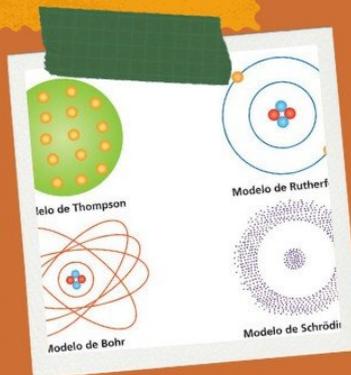


EL ÁTOMO

Unidad básica que puede intervenir en una combinación química. Está formado por partículas subatómicas, de las cuales las más importantes son los electrones, los protones y los neutrones

MODELO ATÓMICO

A principios del siglo XX, Bohr propuso un modelo planetario para explicar la estructura atómica. Pero a finales de los 1920, Schrödinger y Heisenberg propusieron un modelo mecánico cuántico



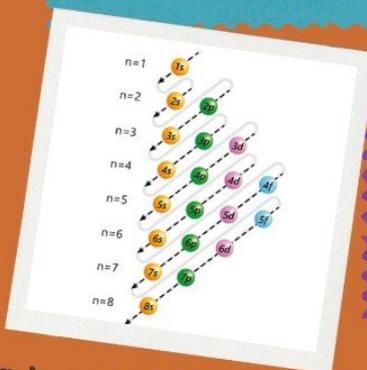
MODELO ATÓMICO DE BOHR

Los electrones pueden saltar de una órbita permitida a otra absorbiendo (si la órbita final está más alejada del núcleo) o emitiendo (si la órbita final está más cercana al núcleo) energía en forma de radiación electromagnética. $\Delta = E_2 - E_1$

CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA

Es la disposición de los electrones en los diversos orbitales atómicos.

- a) un orbital no puede tener más de dos electrones, los cuales deben girar en direcciones opuestas.
- b) Los electrones no se juntan en un orbital si existe otro disponible con la misma energía.

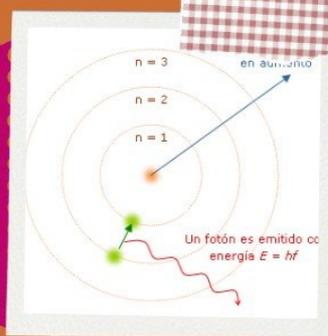


CONFIGURACIONES ELECTRÓNICAS CON KERNEL

Se puede utilizar partir del gas noble cuyo número de electrones sea inmediato inferior al del átomo que va a representar, se utiliza el gas noble del periodo uno (renglón uno).

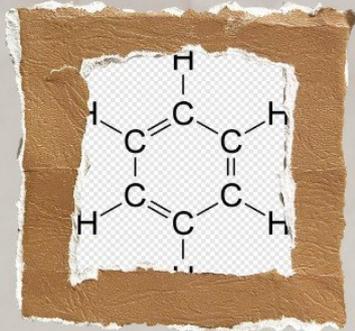
EL MODELO DEL ATOMO DE BOHR NO PUDO EXPLICAR:

- Los espectros de átomos más complejos que átomo de hidrógeno.
- Variación de la intensidad de las líneas espectrales.
- La disposición y la distribución de los electrones en varias órbitas.
- La estructura fina de las líneas espectrales de hidrógeno.



Representación de moléculas orgánicas a partir de estructuras de Lewis

ESTRUCTURAS DE LEWIS Y RESONANCIA.

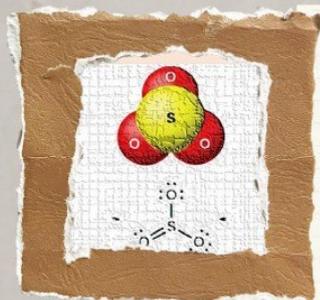
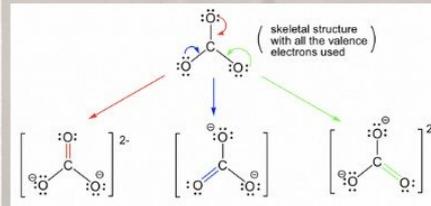


¿QUÉ ES?

Es una 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.

FUNCIÓN

Puede argumentarse sobre la reactividad de un compuesto, su estabilidad, el cómo y qué mecanismo seguirá la molécula cuando reaccione.



¿CÓMO SE HACE?

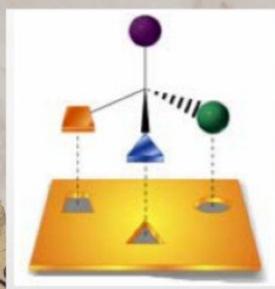
- Se necesita fórmula química del compuesto.
- Se recurre a la tabla periódica para ubicar cuáles son los grupos a que pertenecen.
- El número de grupo es igual a la cantidad de electrones (puntos) de valencia. Todos ellos tienen en común la tendencia de completar el octeto de la capa de valencia.

APLICANDO CON LA FÓRMULA MATEMÁTICA

Conociendo a qué grupo pertenecen los elementos y el número de electrones de valencia disponibles para formar enlaces, se usa esta fórmula $C = N - D$

Donde C significa electrones compartidos como cada enlace lo conforman dos electrones, entonces $C/2$ es igual al número de enlaces que deben dibujarse. N son los electrones necesarios y D son los electrones disponibles.

Teniendo los átomos, sus puntos y el número de enlaces $C/2$, puede entonces improvisarse una estructura de Lewis.



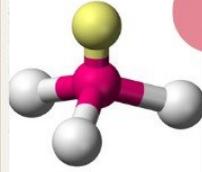
SIMETRÍA Y LAS CARGAS FORMALES

La naturaleza tiene una alta preferencia por originar estructuras moleculares lo más simétricas posibles, evitando plantear estructuras desordenadas, de tal manera que no obedecen ningún patrón aparente.

Y las cargas formales se pueden agregar o quitar enlaces de forma que la carga formal de un átomo corresponda a la carga total exhibida.

Geometría molecular a partir de estructuras de Lewis

GEOMETRÍA MOLECULAR: TIPOS Y EJEMPLOS



¿QUÉ ES?

Es la distribución espacial de los átomos alrededor de un átomo central. Los átomos representan regiones donde existe una alta densidad electrónica, considerando grupos electrónicos.

FORMAS GEOMÉTRICAS CAPACES DE ADOPTAR LAS MOLECULA

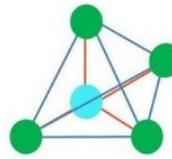
Algunos como ejemplo sería el triángulo y el octaedro.
Los puntos verdes representan los átomos y las franjas anaranjadas los enlaces.

TIPOS DE GEOMETRÍA MOLECULAR

La geometría molecular depende de cuántos átomos rodean al átomo central. Si están presentes un par de electrones sin compartir, éste modificará la geometría debido al volumen ocupado. Por lo tanto, ejerce un efecto estérico.

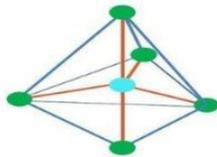
TETRAÉDRICA

Para la molécula del agua, su geometría electrónica es tetraédrica, pero al eliminar los pares libres de electrones puede notarse que se transforma en una geometría angular.



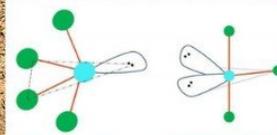
BIPIRÁMIDE TRIGONAL

Se puede apreciar con los cinco puntos verdes: tres en la base triangular, y dos en posiciones axiales, los cuales son los vértices superior e inferior de la pirámide siendo cinco los grupos electrónicos entorno al átomo central.



OSCILANTE Y FORMA DE T

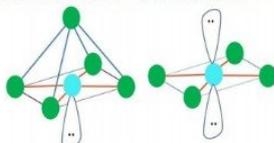
Esta geometría molecular es el resultado de sustituir dos átomos por dos pares de electrones, trayendo como consecuencia que los tres átomos restantes se alineen en un mismo plano que dibuja exactamente una letra T.



OCTAÉDRICA

Son compuestos AB_6 . AB_4 forman la base cuadrada, mientras que los dos B restante se posicionan en posiciones axiales. Así, se forman varios triángulos equiláteros, los cuales son las caras del octaedro. consiste de una pirámide con base cuadrada, y AB_4 de un plano cuadrado.

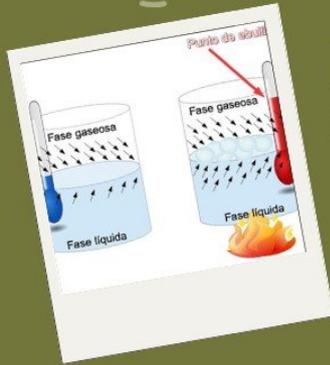
Estas dos geometrías moleculares son las más estables en términos de repulsión electrostática.



ESTRUCTURA Y PROPIEDADES DE LAS MOLÉCULAS

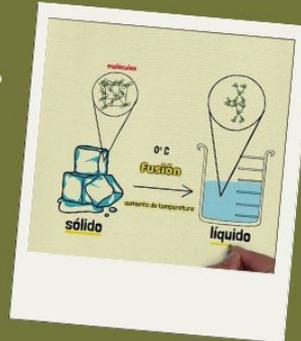
PUNTOS DE EBULLICIÓN.

Es la temperatura a la cual el compuesto líquido se convierte en gas. Siendo la tracción entre las moléculas, "si las moléculas se mantienen unidas por fuertes fuerzas, se necesitará mucha energía para apartar las moléculas unas de otras".



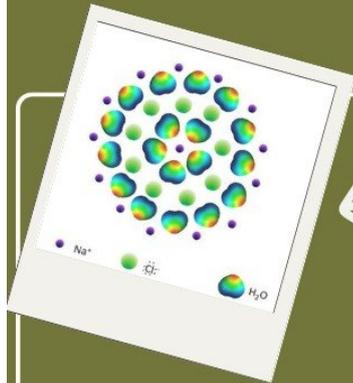
PUNTO DE FUSIÓN

Es la temperatura a la que un sólido se convierte en líquido y hace uso del empaquetamiento cual determina como se acomodan las moléculas dentro de una red cristalina. Cuanto mejor se ajusten al cristal mayor energía será necesaria para romper la red mayor punto de fusión.



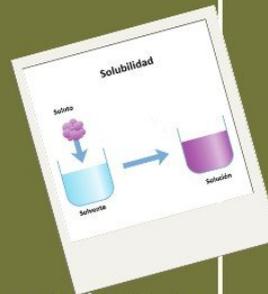
EFFECTOS DE LA POLARIDAD SOBRE LA SOLUBILIDAD

- 1) Un soluto polar con un disolvente polar.
- 2) Un soluto polar con un disolvente no polar.
- 3) Un soluto no polar con un disolvente no polar.
- 4) Un soluto no polar con un disolvente polar.



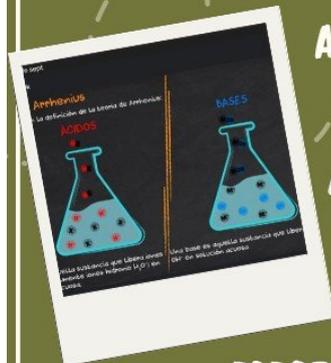
SOLUBILIDAD

"Lo semejante disuelve a lo semejante, las sustancias polares se disuelven en disolventes polares y las no polares en disolventes no polares."



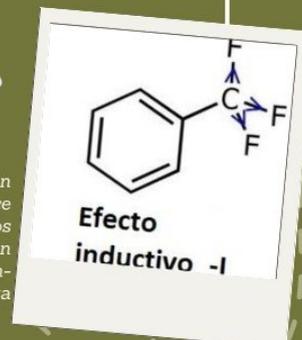
ACIDEZ EN LAS MOLÉCULAS ORGÁNICAS

Para Arrhenius 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⁻). Ayudando a comprender el comportamiento de muchos ácidos y bases.



EFFECTO INDUCTIVO Y FUERZA ACIDA

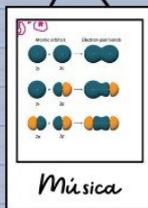
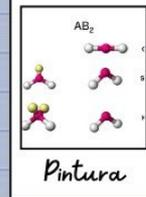
Es un sustituyente que establece al anión carboxilato aumenta la disociación y produce un ácido más fuerte. Los átomos electronegativos aumentan la fuerza de un ácido porque su efecto inductivo electrónico contribuye a deslocalizar la carga negativa del anión carboxilato.



MODELO DE REPULSIÓN DEL PAR ELECTRÓNICO DE LA CAPA DE VALENCIA

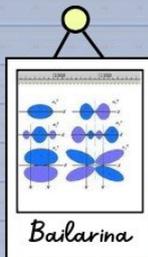
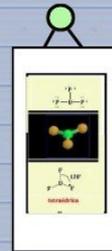
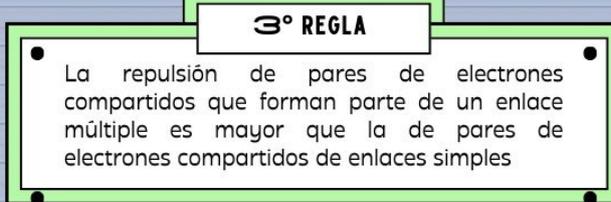
1º REGLA

Una vez establecida la geometría de una molécula, pueden ser entendidas pequeñas diferencias en ángulo, los pares solitarios repelen a otros pares electrónicos cercano enlace.



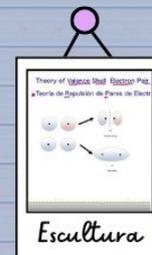
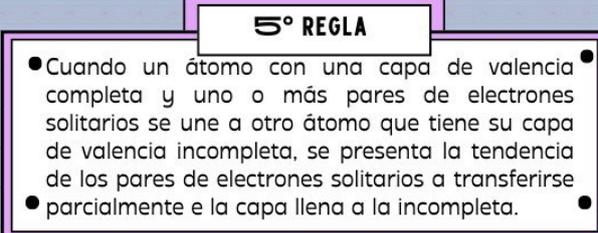
2º REGLA

La repulsión entre pares de electrones compartidos decrece con el incremento de la electronegatividad del ligante, X.



4º REGLA

Las repulsiones entre pares de electrones en capas llenas es mayor que aquella entre pares de electrones en capas incompletas,



6º REGLA

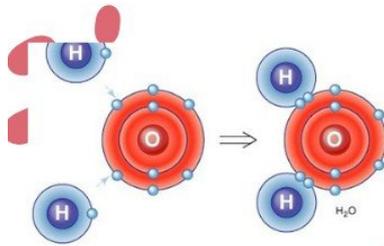
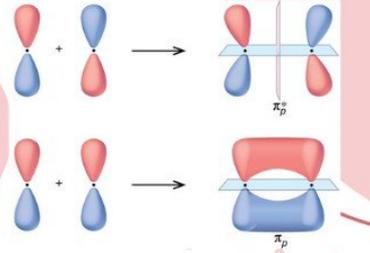
- En una capa de valencia que contenga cinco pares de electrones (donde no todos son equivalentes), aquellos que tengan mayor número de vecinos cercanos estarán a una distancia mayor que los otros.

Este modelo fue propuesto por R. J. Gillespie y R. S. Nyholm en 1957. Los electrones alrededor de A están apareados. Los pares adquieren en el espacio una posición de tal que cada uno esté lo más alejado posible de los demás.

MODELO DEL ORBITAL MOLECULAR (OM)

CONSIDERA

Que los electrones de una molécula ocupan orbitales moleculares, al igual que en un átomo los electrones ocupan orbitales atómicos.

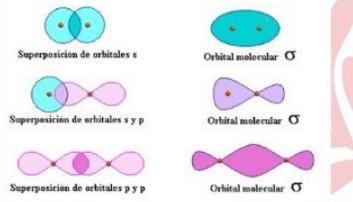


ELECTRONES

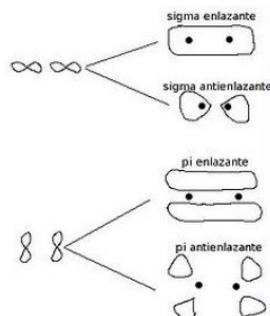
Están bajo la influencia del núcleo atómico. La zona del espacio donde viven depende del tipo de orbital en el que se encuentran. Por ello se encuentran en orbitales moleculares con energía y "forma" diferentes.

ORBITALES MOLECULARES (O.M.)

Se generan por combinación lineal de orbitales atómicos (o.a.) de la misma simetría y de similar energía. Estaban definidos por una función de onda, las combinaciones entre ellos se tomarán como interferencias constructivas o destructivas.



TIPOS DE ORBITALES

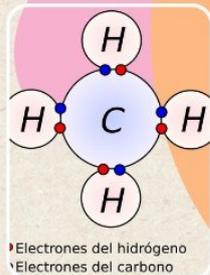
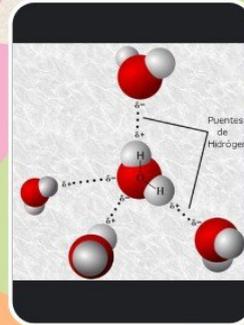


- O.M. Enlazante
- Energía menor que el orbital de partida
- Interferencia constructiva
- Genera Enlace Químico
- O.M. Antienlazante
- Interferencia destructiva
- Energía mayor que el orbital de partida
- Orbital Antienlazante (densidad electrónica baja entre núcleos)

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

Se pueden dar entre las moléculas una serie de interacciones, pero son las responsables de las propiedades físicas de los compuestos orgánicos.

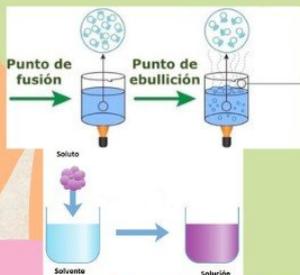
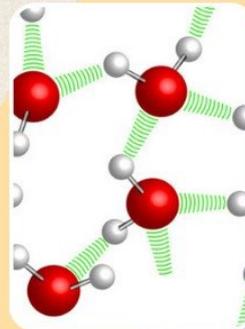


ENLACE COVALENTE

Es la unión que explica el mantenimiento de la unidad estructural de un compuesto orgánico.

INTERACCIONES INTERMOLECULARES

Hacen que las moléculas se asocien para formar sólidos y líquidos.



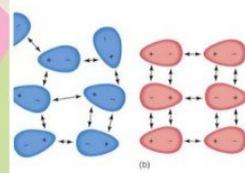
EFFECTOS DE ESTAS FUERZAS

- Los puntos de fusión
- De ebullición
- Las solubilidades de los compuestos orgánicos

TIPOS DE INTERACCIONES INTERMOLECULARES

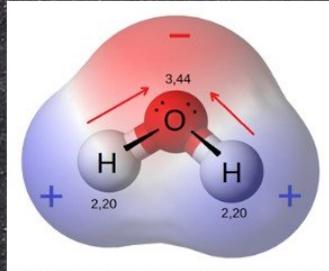
- Las fuerzas entre dipolos de las moléculas polares.
- Las fuerzas de London que afectan a todas las moléculas.
- Los puentes de hidrógeno que atraen moléculas que tienen grupos OH y NH.

Fuerzas dipolo-dipolo



Prof. Edgar González

POLARIDAD DE LAS MOLÉCULAS



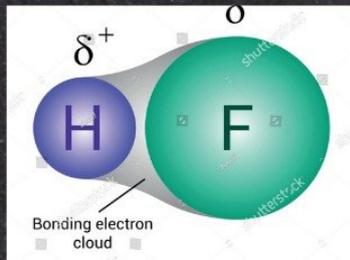
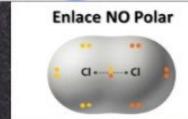
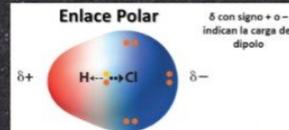
POLARIDAD

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.

ENLACE

ENLACE APOLAR: Si los átomos son iguales (ya que ningún átomo atrae con más fuerza los electrones).

ENLACE POLAR: Si los átomos son diferentes, el átomo más electronegativo atraerá par de electrones con más fuerza.



H-H

H ningún átomo es más electronegativo que el otro. Por tanto, tiene un enlace APOLAR

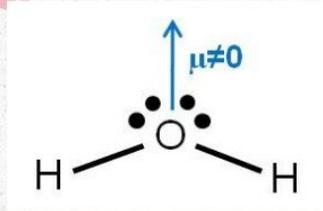
H-F

El flúor es más electronegativo que el hidrógeno. Por tanto, el par de electrones se siente atraído hacia el flúor. Se usa una flecha para señalar la polarización cual apunta al átomo más electronegativo.

a) enlace covalente no polar (cargas distribuidas homogéneamente)



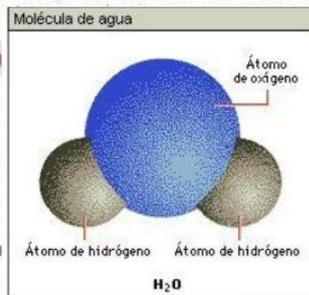
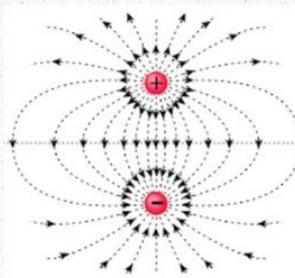
MOMENTO DIPOLAR



¿QUÉ ES?
Es una medida cuantitativa de la polaridad de una molécula.

EN PRESENCIA DE UN CAMPO ELÉCTRICO

Aquellas con un momento dipolar diferente a cero (molécula polar) son alineadas en la dirección del campo, mientras que las moléculas apolares no se ven afectadas.

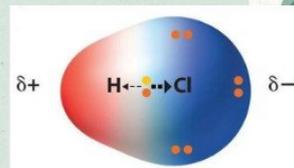


MOLÉCULAS CON MÁS DE DOS ÁTOMOS

El momento dipolar dependerá de la polaridad de todos sus enlaces y de la geometría molecular.

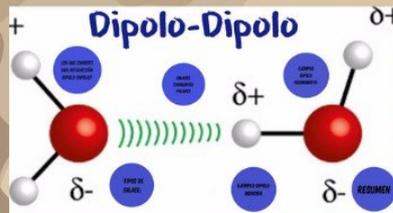
ENLACES POLARES

La presencia de enlaces polares NO IMPLICA necesariamente que la molécula sea polar.



INTERACCIONES MOLECULARES

ATRACCIÓN DIPOLO-DIPOLO

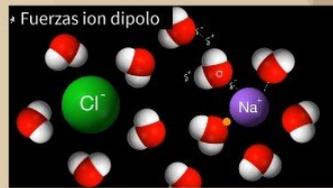


Son fuerzas que se producen entre dos o más moléculas polares, por atracción entre cargas parciales positivas y negativas (Foto).

Ejemplo puente de Hidrógeno.

ATRACCIÓN IÓN-DIPOLO (FOTO)

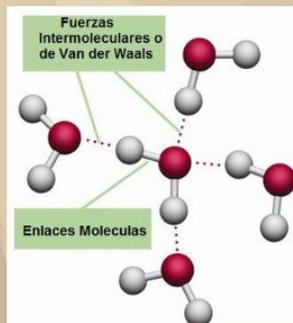
Fuerza entre un ión positivo o negativa y una molécula polar.



FUERZAS DE VAN DE WAALS (FUERZAS DE LONDON)

Son atracciones débiles entre moléculas no polares.

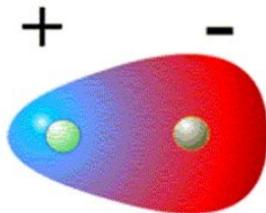
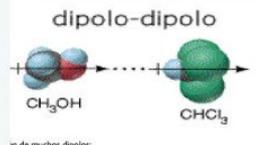
Se producen cuando estas moléculas no tienen polos y son inducidas a provocar un desplazamiento momentáneo de los electrones, generando un polo positivo y uno negativo, gracias al cual se sienten atraídas.



FUERZAS DIPOLO DIPOLO

ESTRUCTURA

Cada momento bipolar molecular tiene un extremo positivo y otro negativo. La situación más estable es la que presenta el extremo positivo cerca del extremo negativo de otra molécula.

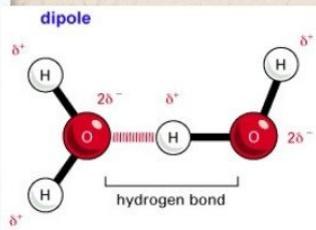


GIRO

Orientarse hacia la situación más estable que es en la orientación positivo-negativo.

FUERZA DE ATRACCIÓN

Estos dipolos se correlacionan de forma que su fuerza neta es de atracción. Cual depende del contacto superficial entre las moléculas y por tanto es proporcional al área molecular.

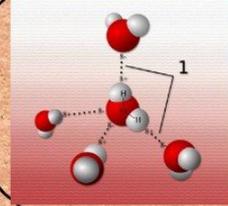


Puente de hidrógeno

1

¿QUÉ SON?

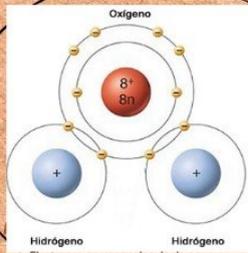
Un puente de hidrógeno no es un enlace verdadero sino una forma especialmente fuerte de atracción entre dipolos.



2

Un átomo de hidrógeno

Puede participar en un puente de hidrógeno si está unido a oxígeno, nitrógeno o flúor.

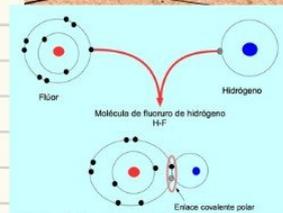


- Puedes crear un listado con tus ideas principales.

3

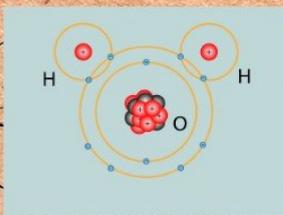
En los enlaces:

O-H, N-H y F-H están muy polarizados dejando al átomo de hidrógeno con una carga parcial positiva.



Conclusión

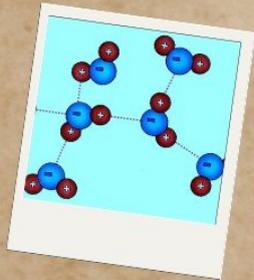
Este átomo de hidrógeno tiene una gran afinidad hacia electrones no compartidos y forma agregados intermoleculares con los electrones no compartidos de los átomos de oxígeno, nitrógeno y flúor.



FUERZAS INTERMOLECULARES:

¿QUÉ SON?

Son aquellas atracciones entre moléculas

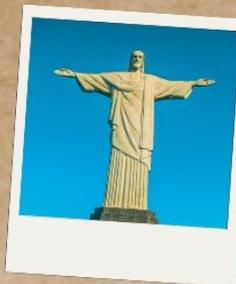
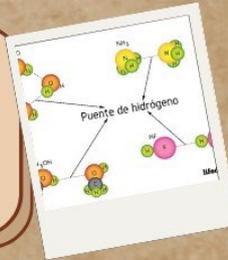


INTENSIDAD DE LAS F. INTERMOLECULARES

Propiedades de los líquidos, como el punto de ebullición, reflejan la intensidad de las fuerzas intermoleculares. Sin embargo los gases hacen disminuir drásticamente al aumentar la distancia entre las moléculas.

TIPOS DE FUERZAS DE ATRACCIÓN ENTRE MOLÉCULAS

- Fuerzas de dispersión de London
- Fuerzas dipolo - dipolo
- Fuerzas de puente de hidrógeno (enlace de hidrógeno)

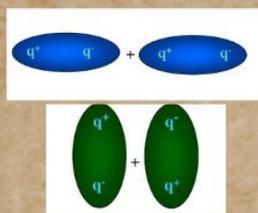
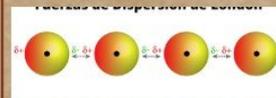


FUERZAS DE DISPERSIÓN DE LONDON

Consiste en las fuerzas intermoleculares entre moléculas no polares haciendo existencia de fuerza que produzca la suficiente atracción para que las moléculas se mantengan unidas entre sí en el estado líquido.

FUERZA ENTRE ÁTOMOS Y MOLÉCULAS NOMPOLARES

Se denomina polarizabilidad, a la facilidad con que la distribución electrónica de un átomo o molécula, puede distorsionarse por acción de un campo eléctrico externo.



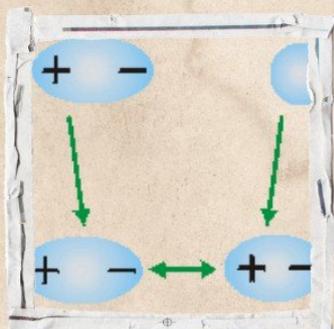
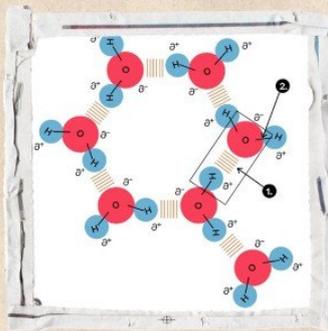
INTERACCIÓN DE MUCHOS DIPOLOS:

Las fuerzas dipolo-dipolo son generalmente más débiles que las fuerzas ión - dipolo. 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

¿Qué son?

Son 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.

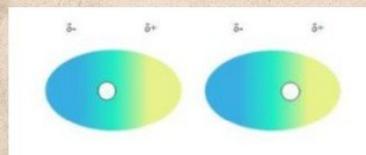


El término incluye:

- Fuerzas dipolo permanente-dipolo permanente (fuerzas de Keesom)
- Fuerzas dipolo permanente-dipolo inducido (fuerzas de Debye)
- Fuerzas dipolo inducido instantáneo-dipolo inducido (fuerzas de dispersión de London)

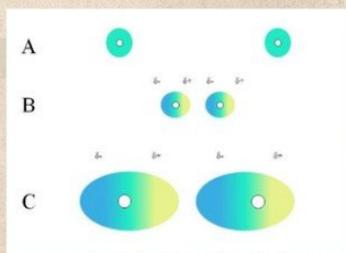
1° fuente de atracción

Interacción electrostática/interacción de Keesom o fuerza de Keesom.



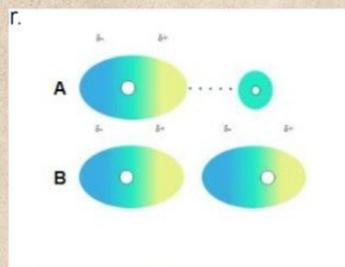
2° fuente de atracción

Es la inducción (también denominada polarización), que es la interacción entre un multipolo permanente en una molécula, con un multipolo inducido en otra.

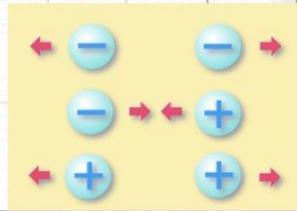


3° fuente de atracción

Denominada dispersión. Es la única atracción experimentada por átomos no polares, pero opera entre cualquier par de moléculas, sin importar su simetría.



FUERZAS ELECTROSTÁTICAS



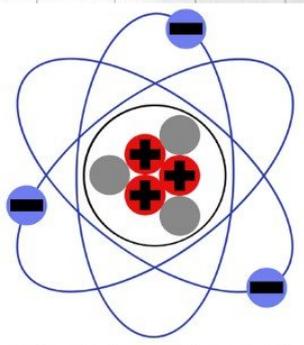
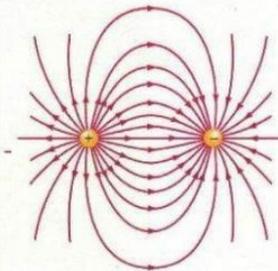
¿QUÉ ES?

Es la interacción que se da entre cuerpos que poseen carga eléctrica.

Cuando las cargas están en reposo, la interacción entre ellas se denomina fuerza electrostática.

CULOMBIO (C)

Es la cantidad de carga que pasa por la sección transversal de un conductor eléctrico en un segundo, cuando la corriente eléctrica es de un amperio.



CARGA ELÉCTRICA

Propiedad fundamental de la materia que poseen algunas partículas subatómicas. Esta carga puede ser positiva o negativa.

SI del electrón:
 $e = -1.602 \times 10^{-19} \text{C}$

MECÁNICA CUÁNTICA

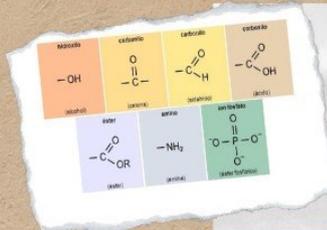
Tras su descubrimiento, Schrödinger desarrolló una ecuación que permite calcular la función de onda asociada a un electrón.

LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

\hat{H} = OPERADOR HAMILTONIANO
 Ψ = FUNCIÓN DE ONDA
E = ENERGÍA

GRUPOS FUNCIONALES



¿QUÉ ES?

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.

MOLÉCULAS BIOLÓGICAS

Están compuestas por un esqueleto de carbono (formado por átomos de carbono e hidrógeno) y algunos otros átomos, incluyendo oxígeno, nitrógeno o azufre. Estos átomos adicionales aparecen en el contexto de grupos funcionales.



Hidrofóbico
(Ausencia de atracción por el agua)

Hidrofílico
(Afinidad por el agua)

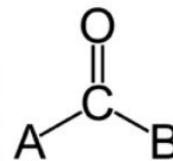
CLASIFICACIÓN DE LOS GRUPOS FUNCIONALES

- Hidrofóbicos
- Hidrofílicos

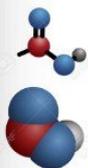
Dependiendo de sus características de carga y polaridad.

GRUPO HIDROFILO

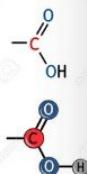
Es el grupo carbonilo (C=O), un grupo funcional sin carga pero polar



Carboxyl group



-COOH



GRUPO MENOS HIDROFILO

Es el grupo carboxilo (COOH), que puede actuar como un ácido y perder un protón para formar un ion carboxilato cargado negativamente (COO⁻).



POLARIDAD DE LOS GRUPOS FUNCIONALES

POLARIDAD DE ENLACE

Si los átomos son iguales, el enlace será apolar (ya que ningún átomo atrae con más fuerza los electrones). Pero, si los átomos son diferentes, el enlace estará polarizado hacia el átomo más electronegativo.



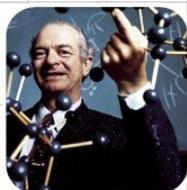
Electronegatividad
• Linus Pauling - Escala arbitraria

1	H	Li	Be	B	C	N	O	F
2	2.1	0.9	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0
3	0.8	1.0	1.3	1.6	1.8	1.9	2.1	2.5
4	0.8	1.0	1.3	1.6	1.8	1.9	2.1	2.5
5								

- 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.

¿CÓMO SE MIDE LA POLARIDAD DE ENLACE?

Se mide mediante su momento dipolar (μ) que se define como la cantidad de diferencia de carga multiplicada por la longitud del enlace.



PAULING

Desarrolló una escala de electronegatividades relativas para la mayoría de los átomos. Actualmente el Sistema Periódico la electronegatividad aumenta de izquierda a derecha y disminuye al bajar en una columna, por lo que el flúor es el elemento más electronegativo.

BIBLIOGRAFÍA

ANTOLOGÍA UDS DE QUÍMICA ORGÁNICA

- Fox, M.A. y Whitesell, J.K., Química Orgánica, 2ª. Edición, México, Ed. Pearson Educación, 2000.
- Morrison, R.T. y Boyd, R.N., Química Orgánica, 5ª. Edición, México, Ed. Addison Wesley
- Longman de México, S.A. de C.V., 1998.
- Masterton, William., Slowinski, Emil., Staninski, Conrad. Química General Superior.
- Interamericana, McGraw-Hill. México.
- McMurry, J., Química Orgánica, 5ª. Edición, México, Ed. International Thomson Editores, S.A. de C.V., 2001.
- Wade, L.G. Jr., Química Orgánica, 2ª. Edición, México, Ed. Prentice Hall Hispanoamericana, S.A. de C.V., 1993.