



SUPER NOTA

Sayuri Suzette Valdez Hernández

INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA ORGÁNICA

Unidad I

QUÍMICA ORGÁNICA

LUZ ELENA CERVANTES MONROY

Licenciatura en nutrición

1er. Cuatrimestre

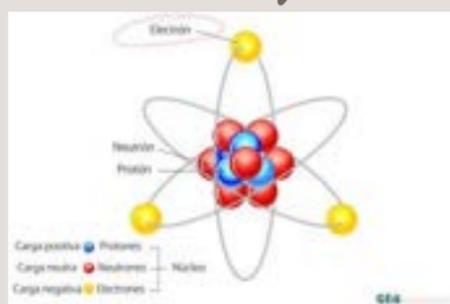
20 / Septiembre / 2024

Conceptos básicos de la estructura atómica y molecular

TEORÍA ATÓMICA

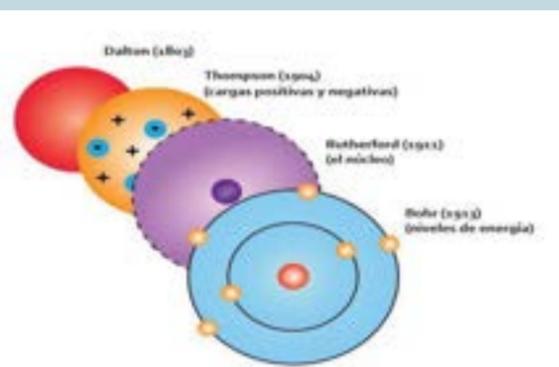
- En 1808, John Dalton estableció las hipótesis sobre las que fundó su teoría atómica:
- Los elementos están formados por partículas pequeñas llamadas átomos.
 - Los compuestos están formados por átomos de más de un elemento en una relación que es un número entero o una fracción sencilla.
 - Una reacción química consiste en la separación, combinación o reordenamiento de los átomos, los cuales no se crean ni se destruyen.

El átomo



MODELOS ATÓMICOS

A principios del siglo XX, Bohr propuso un modelo planetario para explicar la estructura atómica: 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. Entre más cercanos estuvieran al núcleo, menor energía presentaba. Este modelo no explicaba algunos resultados experimentales y por ello, a finales de los 1920, Schrödinger y Heisenberg propusieron un modelo mecánico cuántico



Modelo atómico de Bohr.

Radio de Bohr (0.53 Å). $E_0 =$ valor absoluto de la energía de la órbita más cercana al núcleo. Estado fundamental del átomo de hidrógeno (13.6 eV). $2 0 0 2 \dots e h r m Z e \pi = 4 2 0 2 2 0 \dots 8. meZ e E \epsilon$
 $h = - 10 3.$

El modelo del átomo de Bohr fue incapaz de explicar lo siguiente:

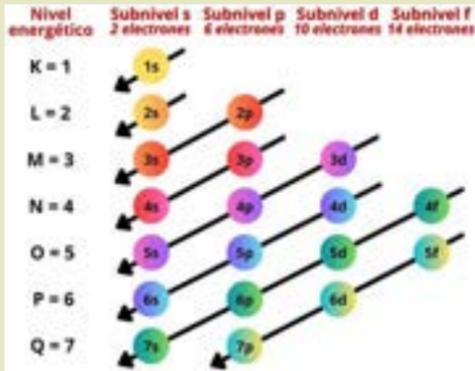
- Los espectros de átomos más complejos que átomo de hidrógeno.
 - Variación de la intensidad de las líneas espectrales.
- La disposición y la distribución de los electrones en varias órbitas.
 - La estructura fina de las líneas espectrales de hidrógeno.
 - Los efectos de Stark y Zeeman.
- n : es el número cuántico principal describe el nivel energético en el que está un electrón dado.
- l : es el número cuántico del momento angular; hace referencia al subnivel energético.



Configuración electrónica

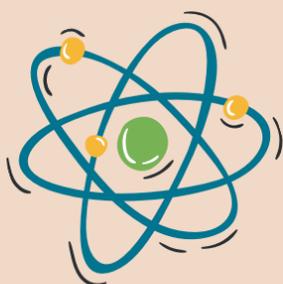
La disposición de los electrones en los diversos orbitales atómicos se conoce como configuración electrónica y cumple con algunas reglas básicas:

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



Configuraciones electrónicas con kernell

Para simplificar una configuración electrónica se puede utilizar las notaciones kernell de los gases nobles y partir del gas noble cuyo número de electrones sea inmediato inferior al del átomo que va a representar. 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).



Configuración Electrónica "Kernel"

| | | | | | | |
|-----------------|---------------------------------|---------------------------------|--|--|---|---|
| 1s ² | 2s ² 2p ⁶ | 3s ² 3p ⁶ | 4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁶ | 5s ² 4d ¹⁰ 5p ⁶ | 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ⁶ | 7s ² 5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7p ⁶ |
| [He] | [Ne] | [Ar] | [Kr] | [Xe] | [Rn] | [Og] |

REPRESENTACIÓN DE MOLÉCULAS ORGÁNICAS A PARTIR DE ESTRUCTURAS DE LEWIS

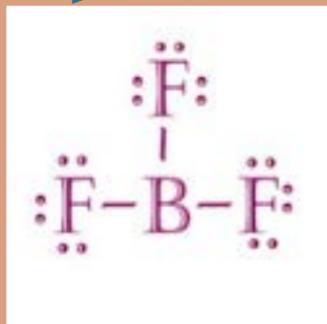
Estructuras de Lewis y resonancia.

¿Cómo se hace?

Para dibujar o bosquejar una estructura, fórmula o diagrama de Lewis es imprescindible la fórmula

química del compuesto. Sin ella no se puede siquiera saber cuáles son los átomos que lo conforman.

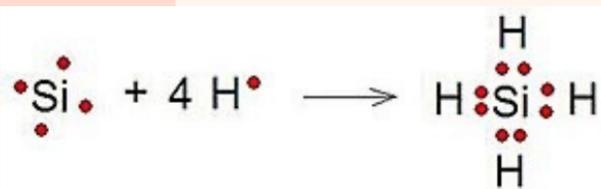
Una vez con ella se recurre a la tabla periódica para ubicar cuáles son los grupos a que pertenecen.



Aplicando la fórmula matemática

Conociendo a qué grupo pertenecen los elementos, y por tanto, el número de electrones de valencia disponibles para formar enlaces, se procede con la siguiente fórmula, la cual resulta útil para dibujar las estructuras de Lewis:

$$C = N - D$$

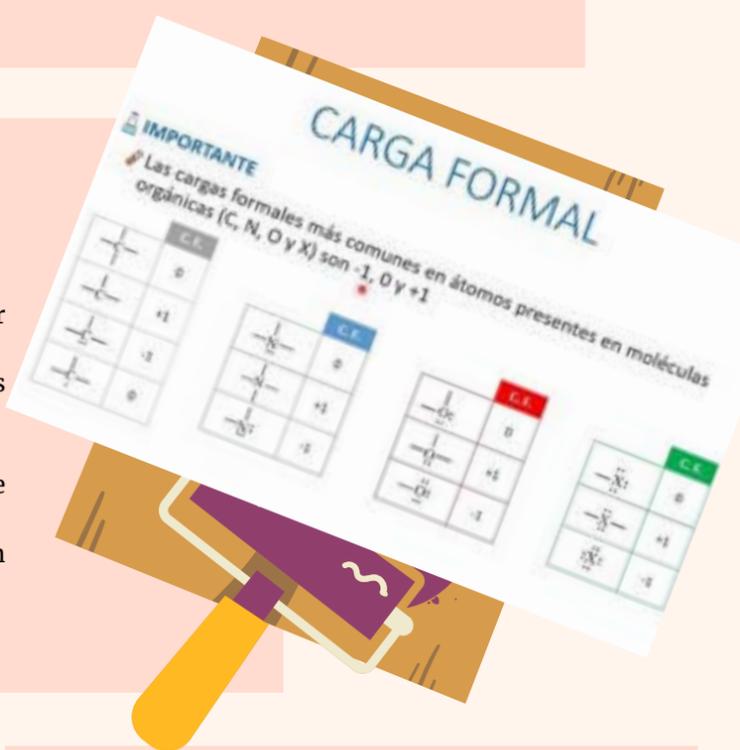


Dónde colocar los átomos menos electronegativos

Los átomos menos electronegativos en la gran mayoría de las estructuras ocupan los centros. Por esta razón, si se tiene un compuesto con átomos de P, O y F, el P debe por lo tanto situarse en el centro de la hipotética estructura. Asimismo, es importante resaltar que los hidrógenos normalmente se enlazan a los átomos muy electronegativos.

Simetría y las cargas formales

La naturaleza tiene una alta preferencia por originar estructuras moleculares lo más simétricas posibles. Esto ayuda a evitar plantear estructuras desordenadas, con los átomos dispuestos de tal manera que no obedecen ningún patrón aparente. Las cargas formales también juegan un papel importante al momento de dibujar las estructuras de Lewis, sobre todo para la de los iones. Así, se pueden agregar o quitar enlaces de forma que la carga formal de un átomo corresponda a la carga total exhibida.



Limitaciones en la regla del octeto

No todas las reglas se cumplen, lo que no necesariamente significa que la estructura sea incorrecta. Considerando esto se tiene la estructura de Lewis del AlF_3 . Los electrones compartidos están resaltados con puntos verdes para distinguirlos de los no compartidos. Aunque los cálculos predicen que son 4 enlaces los que deben formarse, el aluminio carece de electrones suficientes y además no hay un cuarto átomo de flúor. Como resultado el aluminio no cumple con la regla del octeto y este hecho no se refleja en los cálculos.



Ejemplos de estructuras de Lewis

El yodo es un halógeno y por tanto pertenece al grupo VIIA. Tiene entonces siete electrones de valencia, y esta simple molécula diatómica puede representarse improvisando o aplicando la fórmula:

$$D = 2 \times 7 \text{ (dos átomos de yodo)} = 14 \text{ electrones}$$

$$N = 2 \times 8 = 16 \text{ electrones}$$

$$C = 16 - 14 = 2 \text{ electrones}$$

$$C/2 = 1 \text{ enlace}$$



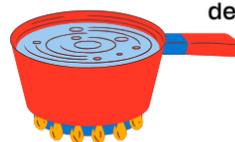
ESTRUCTURA Y PROPIEDADES DE LAS MOLÉCULAS.

PUNTOS DE EBULLICIÓN.

Para que un compuesto se vaporice, las fuerzas que mantienen las moléculas unidas unas a otras deben romperse.



Los alcanos tienen punto de ebullición relativamente bajo porque se trata de moléculas polares. En los alcoholes, éteres sus puntos de ebullición serán mayores que los de los alcanos. En el caso de alcoholes y las aminas, además de estas fuerzas entre dipolos intervienen las fuerzas por puente de hidrógeno. el punto de ebullición de los alcoholes será mayor que el de las aminas.



Solubilidad

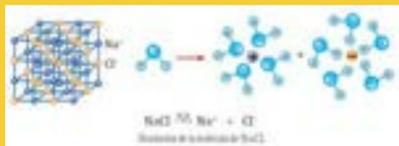


PUNTO DE FUSIÓN.

Es la 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. El empaquetamiento determina como se acomodan las moléculas dentro de una red cristalina.

HAY CUATRO CASOS DISTINTOS A LA HORA DE CONSIDERAR LOS EFECTOS DE LA POLARIDAD SOBRE LA SOLUBILIDAD.

El cloruro de sodio (NaCl) se disuelve fácilmente en agua



Un soluto no polar con un disolvente no polar, como la cera de parafina que se disuelve en gasolina.



Un soluto no polar con un disolvente polar, como la cera de parafina y el agua.



Un soluto polar con un disolvente no polar, como el cloruro sódico (soluto polar) en la gasolina (disolvente no polar). En este caso no se produce la disolución del soluto

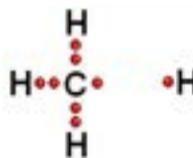
Ácido



Base

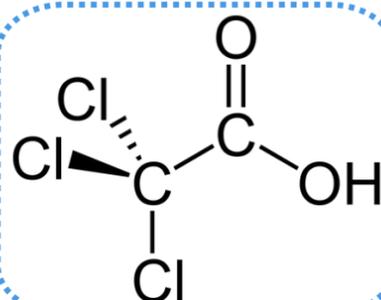
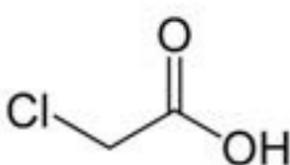
ACIDEZ EN LAS MOLÉCULAS ORGÁNICAS.

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.

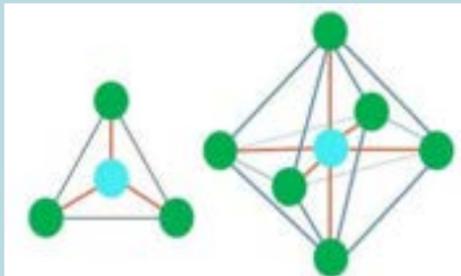


EFEECTO INDUCTIVO Y FUERZA ÁCIDA.

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 electrón-atrayente contribuye a deslocalizar la carga negativa del anión carboxilato.



GEOMETRÍA MOLECULAR A PARTIR DE ESTRUCTURAS DE LEWIS.

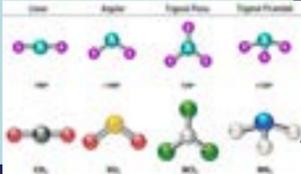


GEOMETRÍA MOLECULAR: TIPOS Y EJEMPLOS

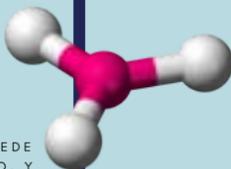
La geometría molecular o estructura molecular es la distribución espacial de los átomos alrededor de un átomo central. la combinación y los datos experimentales de dos teorías: la del enlace de valencia (TEV) y la de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV). Mientras que la primera define los enlaces y sus ángulos, la segunda establece la geometría y, por consiguiente, la estructura molecular.

¿CÓMO SABER CON ANTELACIÓN LA GEOMETRÍA MOLECULAR DE UN ÁTOMO X?

Para ello, es necesario considerar también los pares de electrones libres como grupos electrónicos. Estos, juntos a los átomos, definirán lo que se conoce como la geometría electrónica, la cual es compañera inseparable de la geometría molecular.



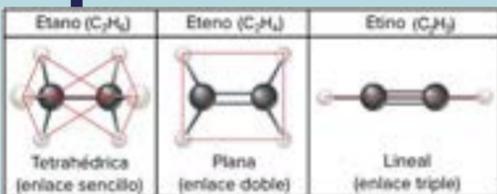
¿Qué formas geométricas son capaces de adoptar las moléculas?



POR EJEMPLO, EN LA IMAGEN SUPERIOR PUEDE APRECIARSE A LA IZQUIERDA UN TRIÁNGULO, Y A LA DERECHA UN OCTAEDRO. LOS PUNTOS VERDES REPRESENTAN LOS ÁTOMOS Y LAS FRANJAS ANARANJADAS LOS ENLACES. POR LO TANTO, UNA MOLÉCULA CON UN ÁTOMO CENTRAL UNIDO A OTROS TRES ADOPTARÁ UNA GEOMETRÍA PLANO TRIGONAL.

¿Cuándo la geometría es igual a la estructura?

LAS GEOMETRÍAS SON ESPECIALMENTE ÚTILES PARA EXPLICAR LA ESTRUCTURA DE UN SÓLIDO A PARTIR DE SUS UNIDADES ESTRUCTURALES. (LINEAL, RAMIFICADA, GLOBULAR, PLANA, ETC.)



TIPOS

Como se aprecia en la imagen principal, la geometría molecular depende de cuántos átomos rodean al átomo central. Sin embargo, si están presentes un par de electrones sin compartir, éste modificará la geometría debido a que ocupa mucho volumen.

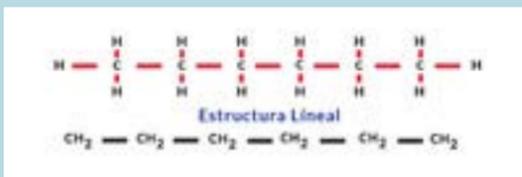


¿Cuándo la geometría es igual a la estructura?

LAS GEOMETRÍAS SON ESPECIALMENTE ÚTILES PARA EXPLICAR LA ESTRUCTURA DE UN SÓLIDO A PARTIR DE SUS UNIDADES ESTRUCTURALES. (LINEAL, RAMIFICADA, GLOBULAR, PLANA, ETC.)

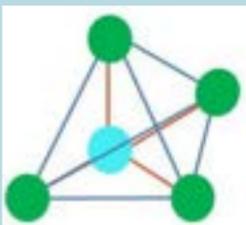
LINEAL

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



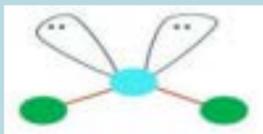
Tetraédrica

LA IMAGEN SUPERIOR REPRESENTA LA GEOMETRÍA 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.



ANGULAR

Se puede suponer en primera instancia una geometría lineal para la molécula AB₂; sin embargo, es primordial dibujar la estructura de Lewis antes de llegar a una conclusión. Dibujada la estructura de Lewis, se puede identificar el número de pares de electrones sin compartir (:) sobre el átomo de A.



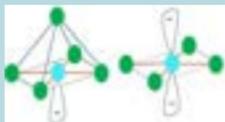
EJEMPLOS

- Geometría lineal
 - Etileno, H₂C=CH₂
- Geometría angular
 - El agua
- Plana trigonal
 - Trifluoruro de boro, BF₃
- Tetraédrica
 - Gas metano, CH₄
 - Pirámide trigonal
 - Amoníaco, NH₃
 - Bipirámide trigonal
 - Pentafluoruro de fósforo, PF₅
- Oscilante
 - Tetrafluoruro de azufre, SF₄
- Forma de T
 - Tricloruro de yodo, ICl₃
- Octaédrica
 - Para culminar, la geometría molecular es la que explica las observaciones de las propiedades químicas o físicas de la materia.

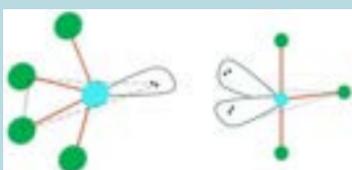
UN PLANO TRIGONAL BIPIRÁMIDE TRIGONAL



OCTAÉDRICA



OSCILANTE Y FORMA DE T



Otras geometrías moleculares

LA BIPIRÁMIDE PENTAGONAL TIENE POR BASE UN PENTÁGONO Y LOS COMPUESTOS QUE LA FORMAN TIENEN FÓRMULA GENERAL AB₅. AL IGUAL QUE LAS OTRAS GEOMETRÍAS MOLECULARES, SUSTITUYENDO LOS ÁTOMOS DE 'A' POR PARES LIBRES DE ELECTRONES DISTORCIONA LA GEOMETRÍA A OTRAS FORMAS. ASIMISMO, LOS COMPUESTOS AB₅ PUEDEN ADOPTAR GEOMETRÍAS COMO LA DE UN PRISMA CUADRADO. ALGUNAS GEOMETRÍAS PUEDEN LLEGAR A SER MUY COMPLICADAS, EN ESPECIAL PARA LAS FÓRMULAS AB₇ EN ADELANTE (HASTA AB₁₂).

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

MODELO DE REPULSIÓN DE PARES ELECTRÓNICOS EN LA CAPA DE VALENCIA. (RPECV).

Es extraordinariamente 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. Cubre satisfactoriamente una gran cantidad de casos,

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

REGLA PRIMERA

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.

REGLA SEGUNDA

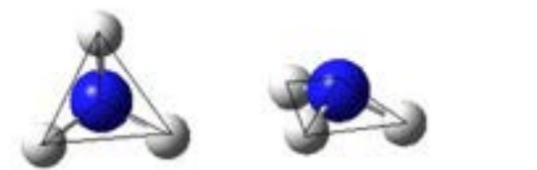
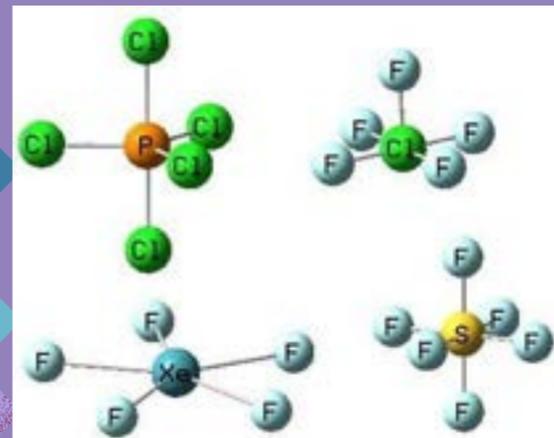
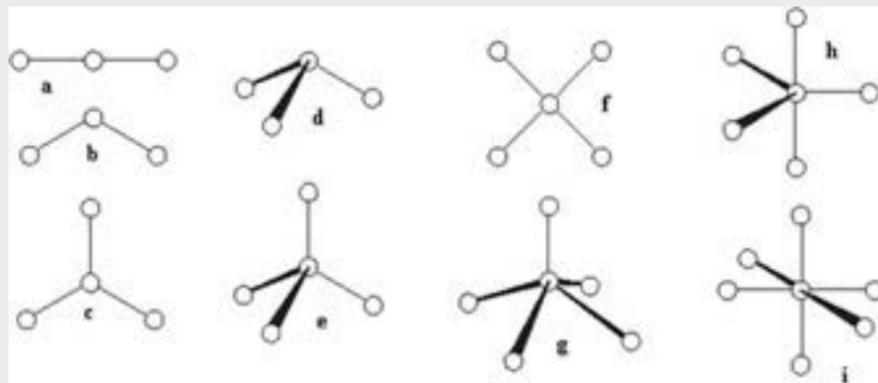
La repulsión entre pares de electrones compartidos decrece con el incremento de la electronegatividad del ligante, X.

REGLA TERCERA

La repulsión de pares de electrones compartidos que forman parte 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 incompletas.



NH_3 GEOMETRÍA PIRÁMIDE TRIGONAL
4 PARES ELECTRÓNICOS:
3 PARES ENLAZANTES + 1 PAR NO ENLAZANTE

REGLA QUINTA

Cuando un átomo con una capa de valencia completa y uno o más pares de electrones solitarios se une a otro átomo que tiene su capa de valencia incompleta, se presenta la tendencia de los pares de electrones solitarios a transferirse parcialmente e la capa llena a la incompleta.

Sin el modelo RPECV

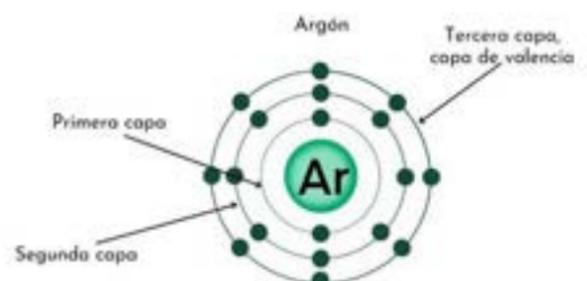
Con el modelo RPECV



REGLA SEXTA

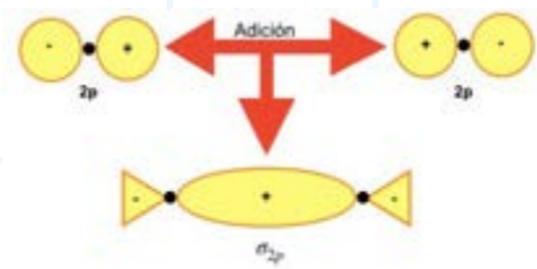
En una capa de valencia que contenga cinco pares de electrones (donde no todos son equivalentes), aquellos que tengan mayor número de vecinos cercanos estarán a una distancia mayor que los otros.

Capa de valencia

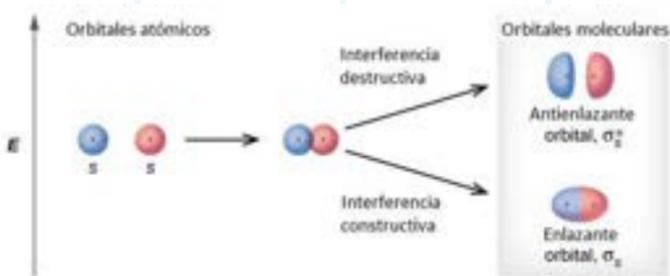


MODELO DEL ORBITAL MOLECULAR MODELO DEL ORBITAL MOLECULAR (OM).

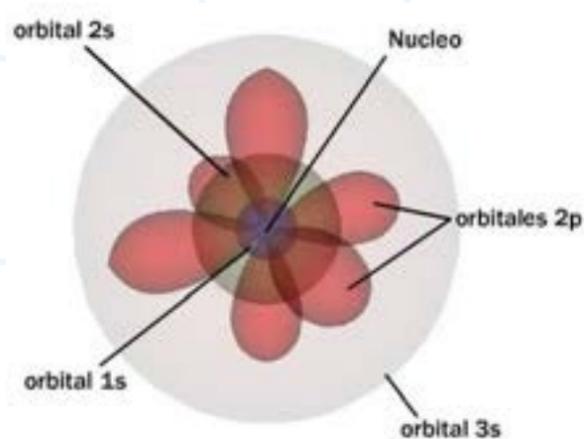
Este modelo considera que los electrones de una molécula ocupan orbitales moleculares, al igual que en un átomo los electrones ocupan orbitales atómicos.



En el átomo los electrones están bajo la influencia del núcleo atómico. La zona del espacio donde preferentemente viven, y por tanto su energía, depende del tipo de orbital en el que se encuentran.



De modo análogo los electrones en una molécula se encuentran en orbitales moleculares con energía y "forma" diferentes. Los orbitales moleculares (o.m.) se generan por combinación lineal de orbitales atómicos (o.a.) de la misma simetría y de similar energía.

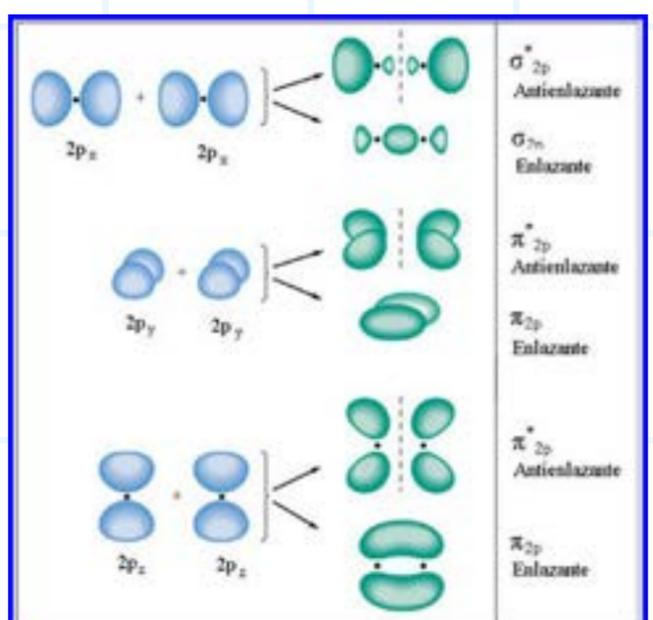


EJEMPLO

Los orbitales moleculares se forman por una combinación lineal de orbitales atómicos. Como los orbitales atómicos estaban definidos por una función de onda, las combinaciones entre ellos se tomarán como interferencias constructivas o destructivas.

TIPOS DE ORBITALES MOLECULARES ENLAZANTES Y ANTENLAZANTES.

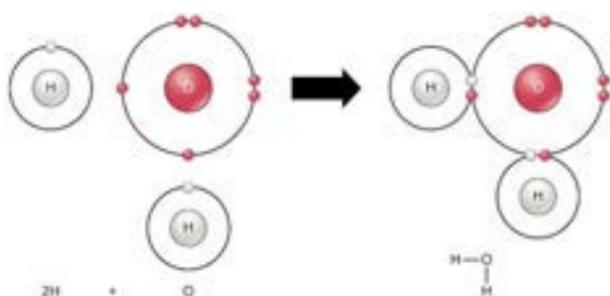
- ☐ O.M. Enlazante
- ☐ Energía menor que el orbital de partida
- ☐ Interferencia constructiva
- ☐ Genera Enlace Químico
- ☐ O.M. Antienlazante
- ☐ Interferencia destructiva
- ☐ Energía mayor que el orbital de partida
- ☐ Orbital Antienlazante (densidad electrónica baja entre núcleos)



TIPOS DE ENLACES EXISTENTES EN COMPUESTOS ORGÁNICOS: C-C, C-O, C-N, C-S Y C-H.

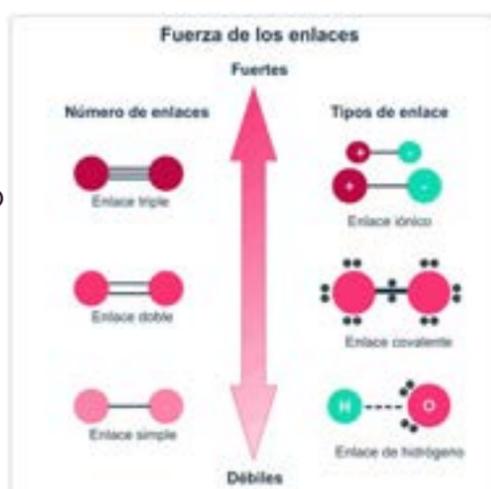
CARACTERIZACIÓN DE CADA UNO DE ELLOS DE ACUERDO A : LONGITUD DE ENLACE, ANGULO DE ENLACE, ENERGÍA DE ENLACE.

ENLACES MÁS DÉBILES QUE EL ENLACE COVALENTE.

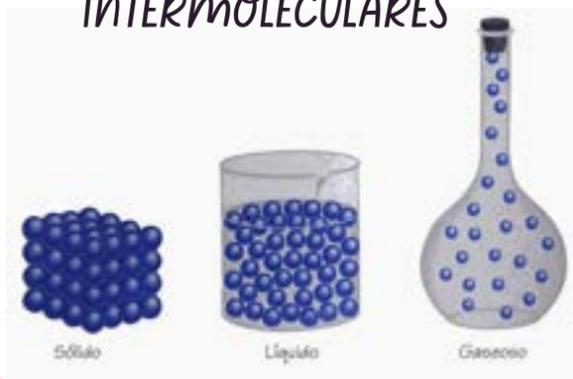


El enlace covalente es la unión que explica el mantenimiento de la unidad estructural de un compuesto orgánico.

Además de este enlace intermolecular se pueden dar entre las moléculas una serie de interacciones, mucho más débiles que el enlace covalente, pero que a menudo son las responsables de las propiedades físicas de los compuestos orgánicos.

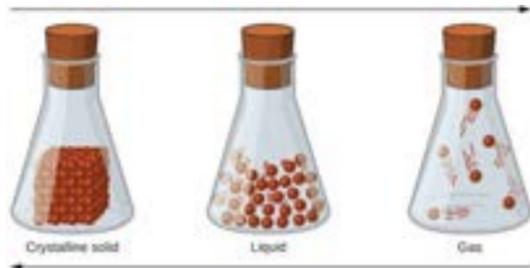


ESPECIAL IMPORTANCIA DE TIPO DE INTERACCIONES INTERMOLECULARES



Son de especial importancia en el estado sólido y líquido, ya que las moléculas están en contacto continuo.

LOS PUNTOS DE FUSIÓN, DE EBULLICIÓN y LAS SOLUBILIDADES



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

HAY TRES TIPOS PRINCIPALES DE INTERACCIONES INTERMOLECULARES



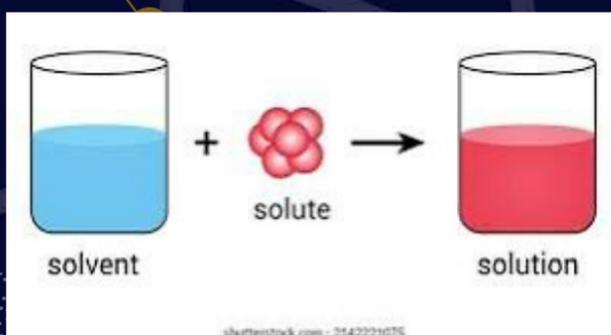
Hacen que las moléculas se asocien para formar sólidos y líquidos: las fuerzas entre dipolos de las moléculas polares, las fuerzas de London que afectan a todas las moléculas, y los puentes de hidrógeno que atraen moléculas que tienen grupos OH y NH.

Polaridad de las moléculas.

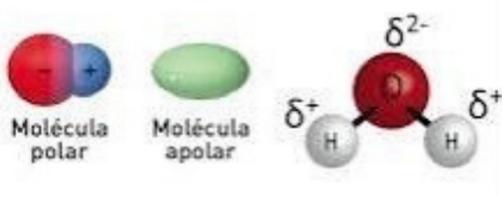
¿Por qué el agua se mezcla homogéneamente con el alcohol y no es capaz de mezclarse con el aceite?

Solubilidad

Es una propiedad física que se relaciona directamente con la polaridad de las moléculas. En esta parte, aprenderemos a establecer si una molécula es polar o no polar (apolar).



POLARIDAD (de los enlaces y de las moléculas)

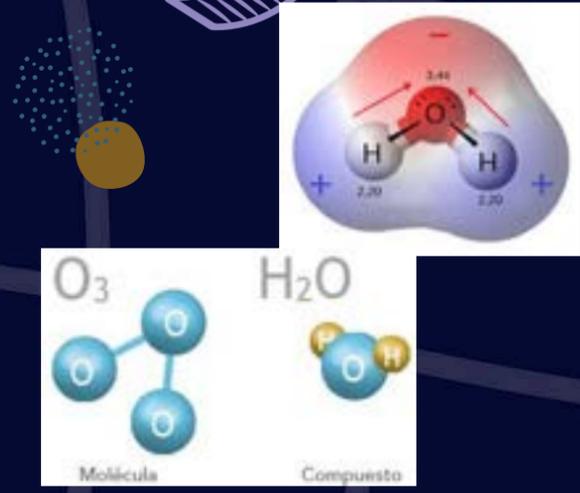


Polaridad

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

Tipo de átomos que lo conforma

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, ya que será el que atraiga el par de electrones con más fuerza.



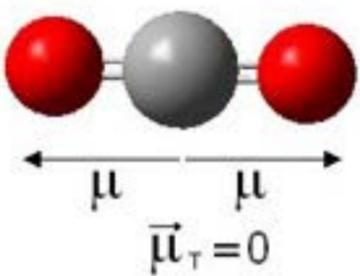
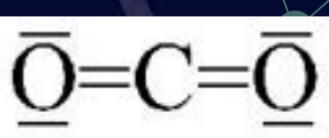
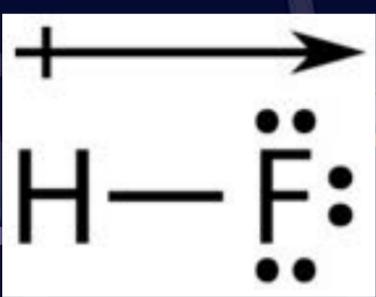
Enlace H-H

En el enlace H-H ningún átomo es más electronegativo que el otro. Por tanto, el par de electrones no se polariza y podemos decir que el momento dipolar (μ) es cero.



Enlace H-F

En el caso del enlace H-F, el flúor es más electronegativo que el hidrógeno. Por tanto, el par de electrones se siente atraído hacia el flúor.



Polarización del enlace

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 (μ) es diferente de cero.

MOMENTO

DIPOLAR

Momento dipolar

El momento dipolar es una medida cuantitativa de la polaridad de una molécula.

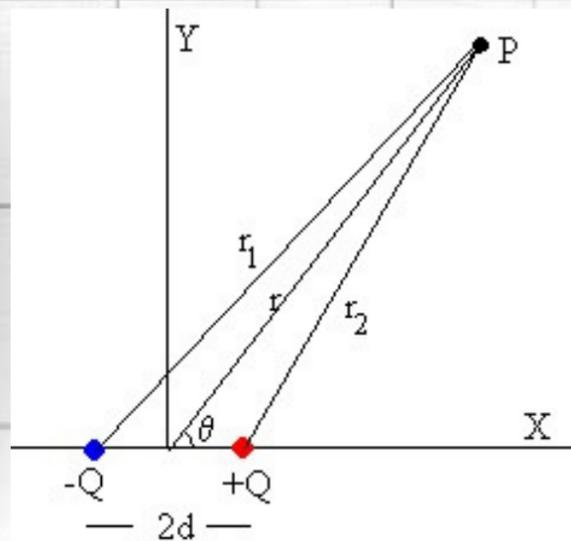
MOMENTO DIPOLAR (μ)

Una molécula con enlaces polares puede o no ser polar - Simetría



En presencia de un campo eléctrico,

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

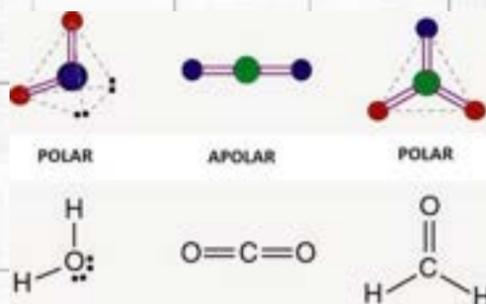


Moléculas con más de dos átomos,

En el caso de moléculas con más de dos átomos, el momento dipolar dependerá de la polaridad de todos sus enlaces y de la geometría molecular.

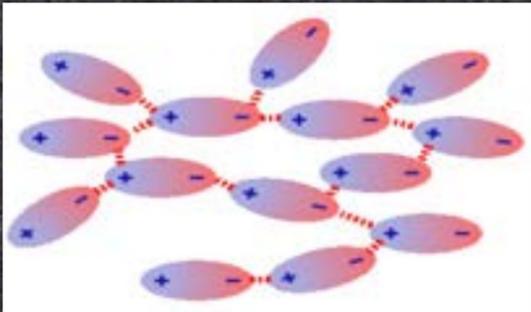
La presencia de enlaces polares

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



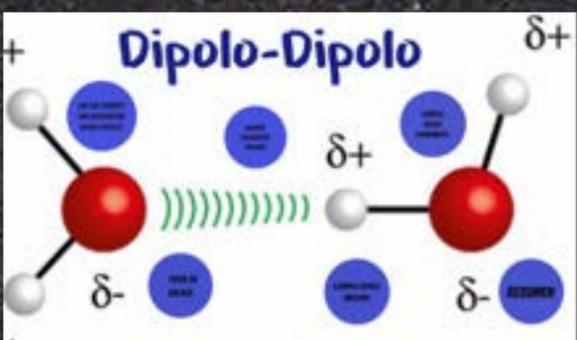
| | Tipo de enlace | Forma molecular |
|--------|------------------------|-----------------|
| Agua | Polar covalente | Doblada |
| Metano | No polar covalente | Tetraédrica |

INTERACCIONES MOLECULARES



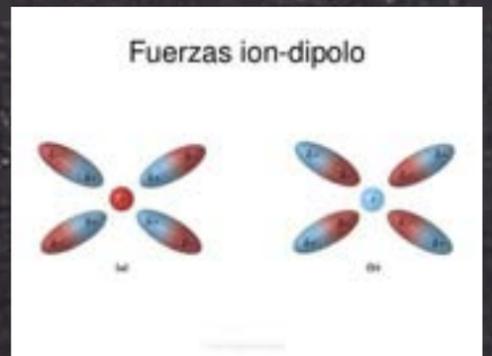
ATRACCIÓN DIPOLO-DIPOLO:

Fuerzas que se producen entre dos o más moléculas polares, por atracción entre cargas parciales positivas y negativas (Foto). Ejemplo puente de Hidrógeno.



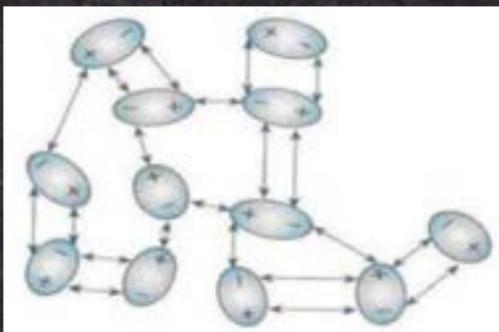
ATRACCIÓN IÓN-DIPOLO

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



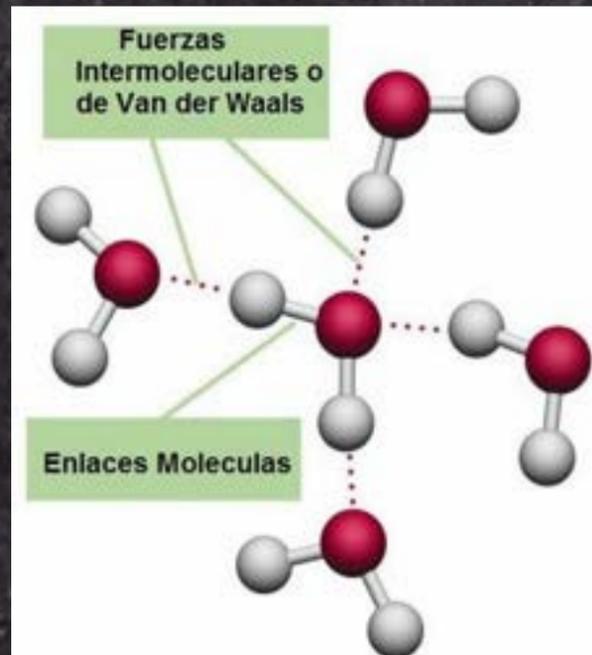
FUERZAS DE VAN DE WAALS

(fuerzas de London): Son atracciones débiles entre moléculas no polares.



¿CUANDO SE PRODUCEN?

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.



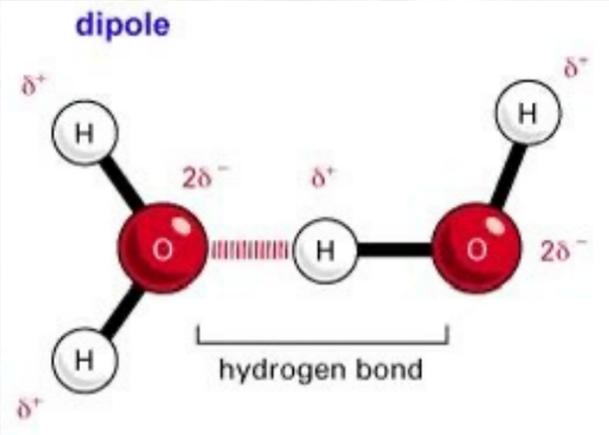
Puente de

Hidrógeno



¿Qué es?

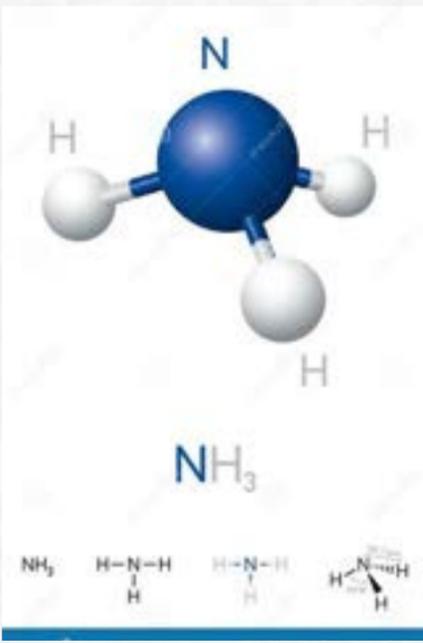
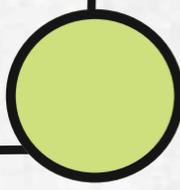
Un puente de hidrógeno no es un enlace verdadero sino una forma especialmente fuerte de atracción entre dipolos.



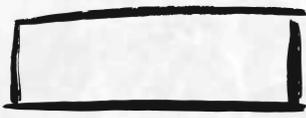
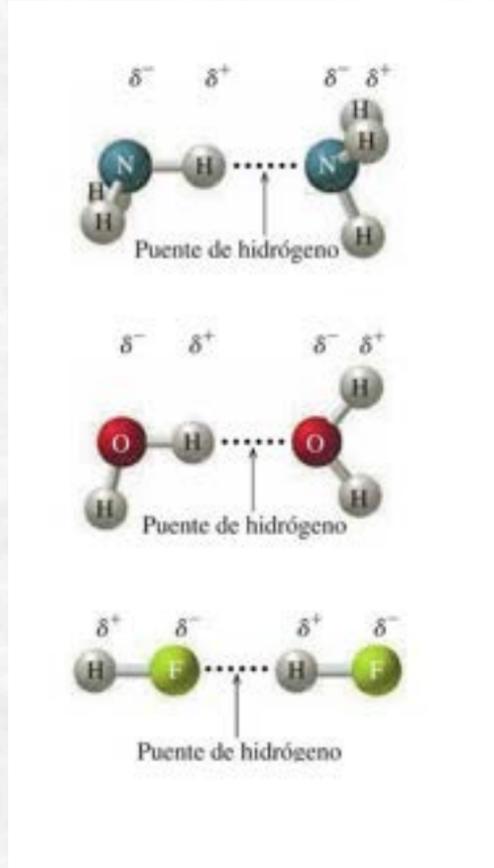
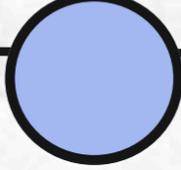
| | |
|------------------|---|
| 1 | H |
| Hidrógeno | |
| 1.0079 | |

Átomo de hidrógeno

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.



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.

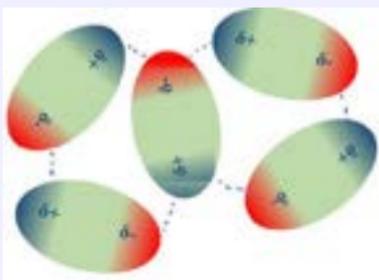


FUERZAS INTERMOLECULARES:

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

FUERZAS

FUERZAS INTERMOLECULARES

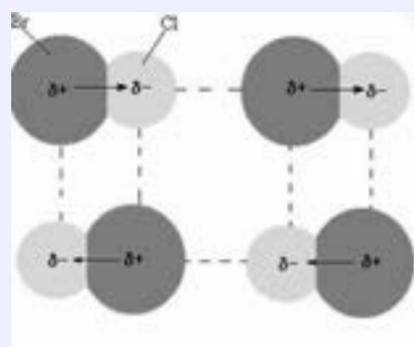
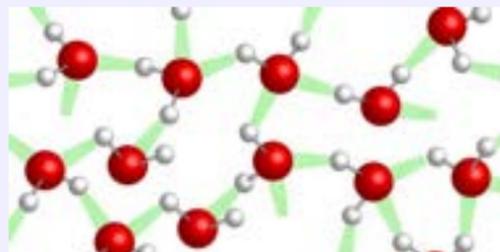


INTENSIDAD

La intensidad de las fuerzas intermoleculares disminuye drásticamente al aumentar la distancia entre las moléculas, por ello en los gases no tienen tanta importancia. Muchas propiedades de los líquidos, incluido su punto de ebullición, reflejan la intensidad de las fuerzas intermoleculares.

Las fuerzas intermoleculares no son tan fuertes como las fuerzas intramoleculares, así por ejemplo, se requieren 41 kJ para vaporizar un 1 mol de agua (inter) y 930 kJ para romper todos los enlaces O-H en 1 mol de agua (intra).

FUERZAS INTRAMOLECULARES

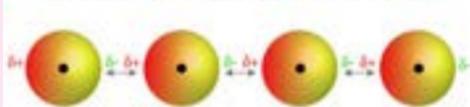


TIPOS DE FUERZAS DE ATRACCIÓN ENTRE MOLÉCULAS

FUERZAS DE DISPERSIÓN DE LONDON

¿Pueden existir fuerzas intermoleculares entre moléculas no polares? Si experimentalmente se consigue licuar los gases no polares, entonces, ¿qué fuerzas son las que actúan sobre las moléculas no polares? Debe existir alguna fuerza que produzca la suficiente atracción para que las moléculas se mantengan unidas entre sí en el estado líquido.

Fuerzas de Dispersión de London



Fuerzas de dispersión de London

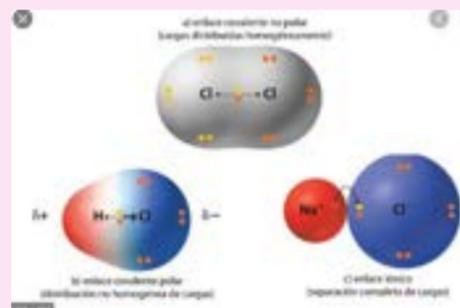
- Fuerzas dipolo - dipolo
- Fuerzas de puente de hidrógeno (enlace de hidrógeno)

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

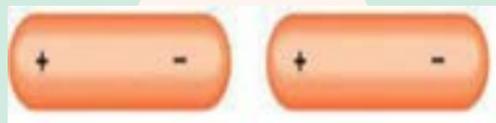
El orden de magnitud relativa de las fuerzas intermoleculares es:
Enlace de hidrógeno > dipolo - dipolo > dispersión de London

¿QUÉ FUERZAS PUEDEN EXISTIR ENTRE ÁTOMOS Y MOLÉCULAS NO POLARES?

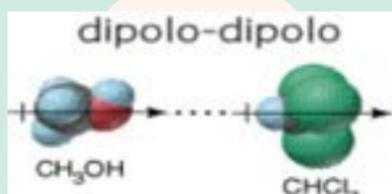
En un átomo o molécula apolar, debido al movimiento de los electrones, en algún instante hay más e- hacia un lado, que al estar cerca de otro átomo o molécula, los electrones del segundo son repelidos, originándose dos dipolos instantáneos, que originan una fuerza de atracción. Los electrones de ambos átomos o moléculas, continúan moviéndose juntos, de modo que se produce una fuerza de atracción.



POLARIZABILIDAD



Se incrementa cuando: hay presencia de gran número de electrones, la nube electrónica es muy difusa, es decir las moléculas y átomos de mayor peso molecular, son más polarizables.

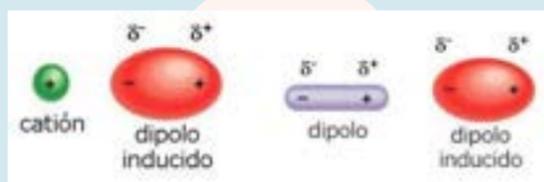


- Las fuerzas de dispersión de London están presentes en todas las moléculas, sean polares o apolares.
- Fuerzas dipolo - dipolo
- Para que existan fuerzas de atracción dipolo-dipolo deben estar presentes moléculas polares.

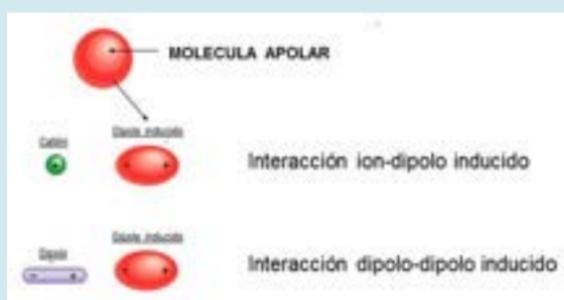


- Las moléculas polares se atraen cuando el extremo positivo de una de ellas está cerca del extremo negativo de la otra:
- Interacción electrostática de dos moléculas polares, (dipolos)

DIPOLO-DIPOLO



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 VAN DER WAALS

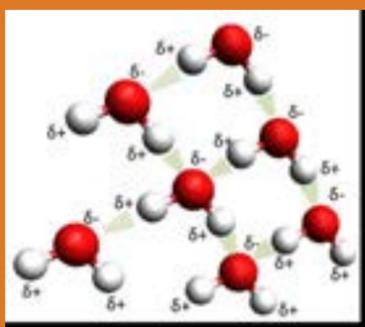
LAS FUERZAS DE VAN DER WAALS SON FUERZAS DE ATRACCIÓN INTERMOLECULAR ENTRE DIPOLOS, SEAN ÉSTOS PERMANENTES O INDUCIDOS.



TIPO:

- Son fuerzas de tipo electrostático que unen a las moléculas tanto polares como apolares.

SU VALOR OSCILA ENTRE 0.1 Y 35 KJ/MOL.



EN QUÍMICA FÍSICA...

Es la fuerza atractiva o repulsiva entre moléculas (o entre partes de una misma molécula) distintas a aquellas debidas al enlace covalente o a la interacción electrostática de iones con otros o con moléculas neutras.

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)

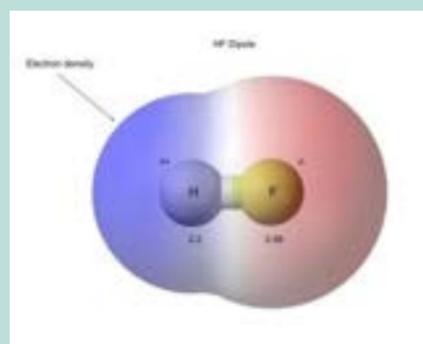
LAS FUERZAS DE VAN DER WAALS

Son relativamente débiles comparadas con los enlaces químicos normales, pero juegan un rol fundamental en campos tan diversos como química supramolecular, biología estructural, ciencia de polímeros, nanotecnología, ciencia de superficies y ciencia de materia condensada.



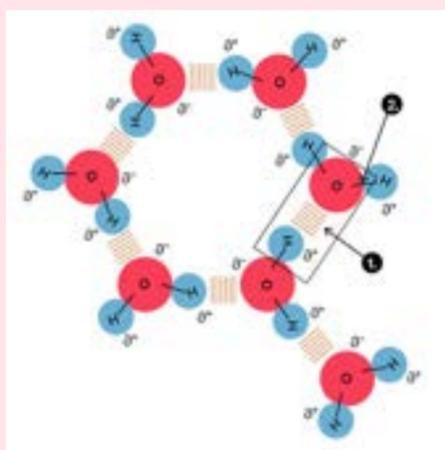
LAS FUERZAS DE VAN DER WAALS DEFINEN:

Definen el carácter químico de muchos compuestos orgánicos. También definen la solubilidad de sustancias orgánicas en medios polares y no polares. En los alcoholes inferiores, las propiedades del grupo polar hidróxilo dominan a las débiles fuerzas intermoleculares de van der Waals. En los alcoholes superiores, las propiedades del radical alquílico apolar (R) dominan y definen la solubilidad.



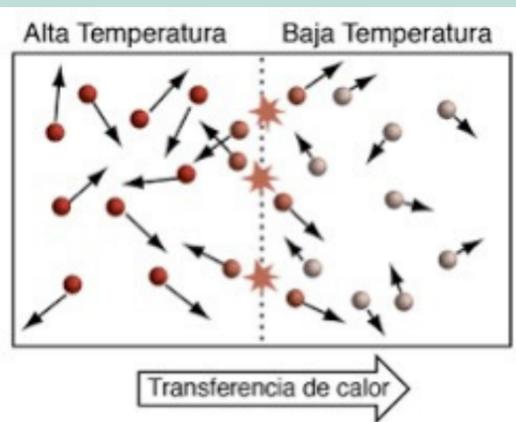
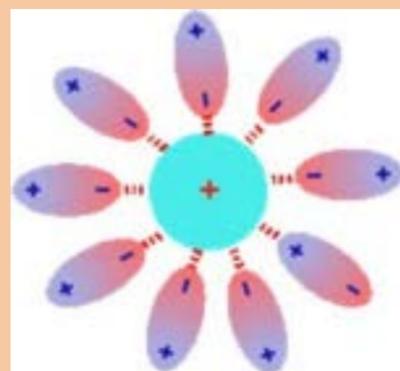
INCLUYEN ATRACCIONES

Incluyen atracciones entre átomos, moléculas, y superficies. Difieren del enlace covalente y del enlace iónico en que están causados por correlaciones en las polarizaciones fluctuantes de partículas cercanas



TAMBIÉN TIENE UN COMPONENTE ATRACTIVO QUE, A SU VEZ, CONSISTE DE TRES CONTRIBUCIONES DISTINTAS:

- 1. La primera fuente de atracción es la interacción electrostática
- 2. La segunda fuente de atracción es la inducción
- 3. La tercera atracción suele ser denominada en honor a Fritz London que la denominaba dispersión.



MOLÉCULAS CON MOVIMIENTO TÉRMICO

- Cuando las moléculas tienen movimiento térmico, como cuando están en fase gaseosa o líquida, la fuerza electrostática se reduce significativamente.

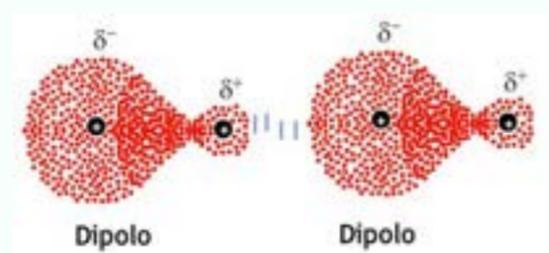
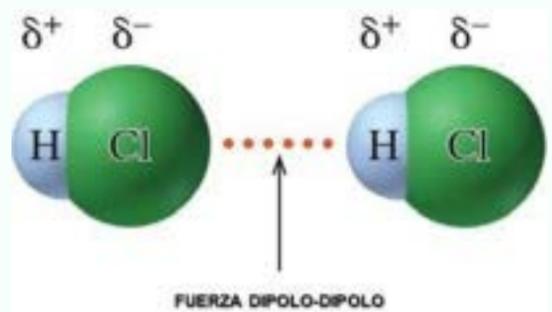
FUERZAS

DIPOLO-DIPOLO

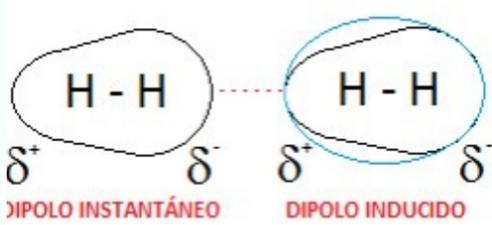
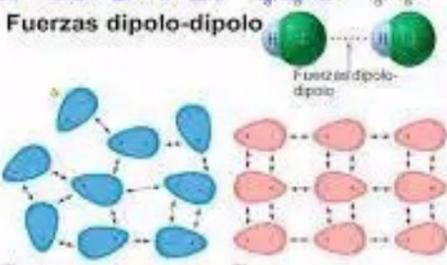
Las moléculas pueden girar y orientarse hacia la situación más estable que es en la orientación positivo-negativo. Las fuerzas entre dipolo-dipolo son fuerzas de atracción intermolecular.

DURACIÓN

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. Esta fuerza de atracción depende del contacto superficial entre las moléculas y por tanto es proporcional al área molecular.



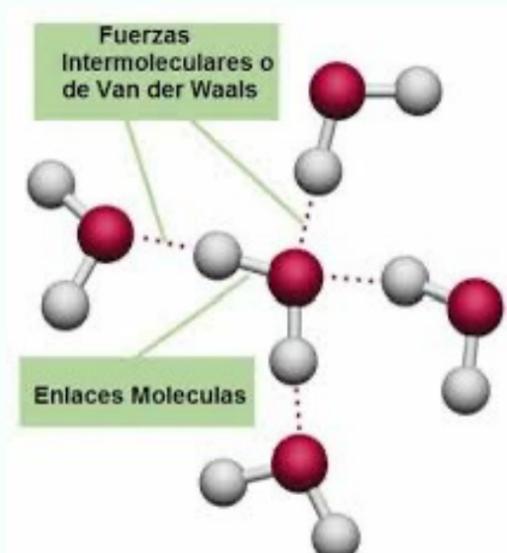
DIPOLO-DIPOLO



El CCl₄ tiene un área superficial mayor que la del cloroformo (CHCl₃) ya que un átomo de cloro es mayor que un átomo de hidrógeno las fuerzas intermoleculares entre las moléculas de CCl₄ son más fuertes que las que aparecen entre las moléculas de CHCl₃.

FUERZAS DE VAN DER WAALS

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. Su valor oscila entre 0.1 y 35 KJ/mol.

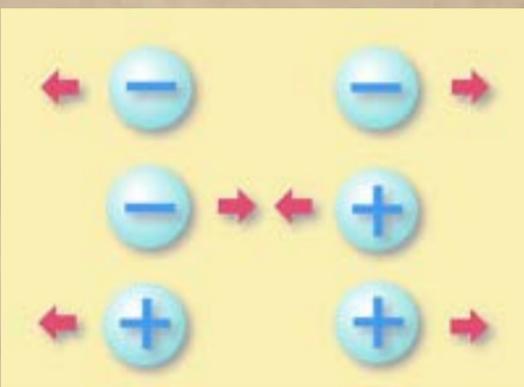


FUERZAS ELECTROSTÁTICAS.

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

1861 JAMES CLERK MAXWELL

Históricamente los fenómenos eléctricos y magnéticos se descubrieron y estudiaron de forma independiente, hasta que en 1861 James Clerk Maxwell unificó todos ellos en las cuatro ecuaciones

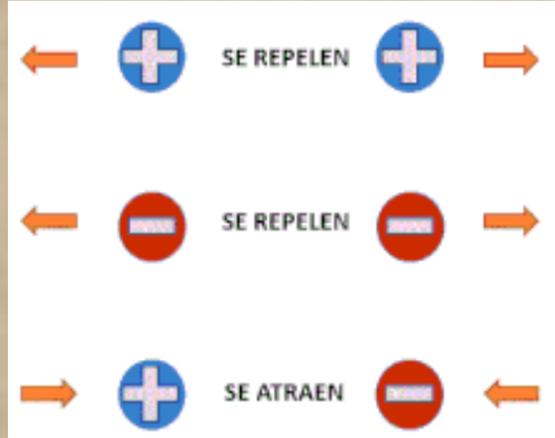


UNIDAD DE CARGA ELÉCTRICA

Un Culombio 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

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



| Particula | Carga (C) |
|--------------|----------------------------------|
| Electrón (e) | $-1.602\ 191\ 7 \times 10^{-19}$ |
| Protón (p) | $+1.602\ 191\ 7 \times 10^{-19}$ |
| Neutrón (n) | 0 |

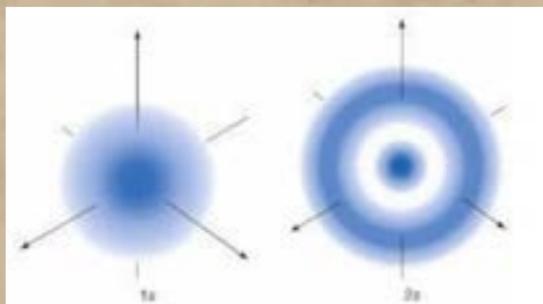
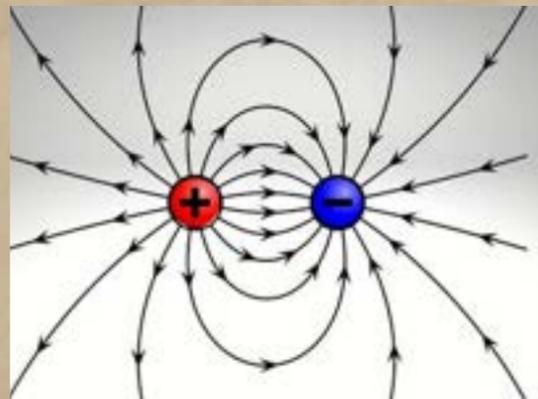
La carga eléctrica es discreta, y la unidad elemental de carga es la que porta un electrón. En el Sistema Internacional, la carga del electrón es:

$$E = -1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$$

El protón tiene la misma cantidad de carga que un electrón pero con signo opuesto.

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.



CARGA PUNTUAL

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

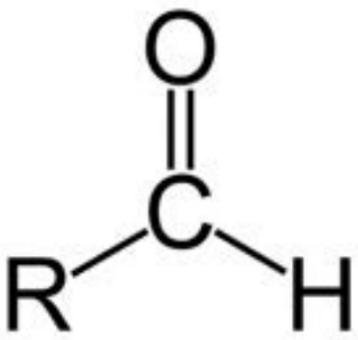
Grupos funcionales

GRUPOS FUNCIONALES

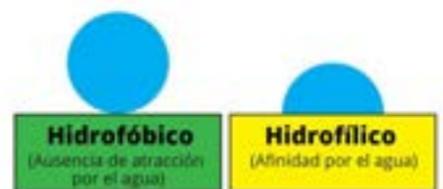
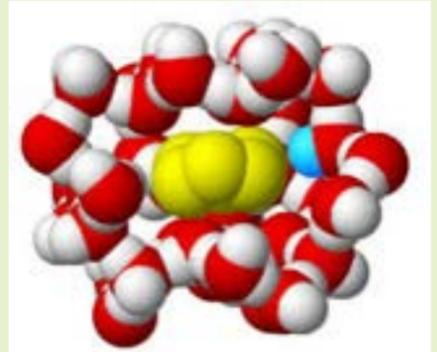
Un grupo funcional es un átomo o un arreglo de átomos que siempre reaccionan de una forma determinada; además, es la parte de la molécula responsable de su comportamiento químico ya que le confiere propiedades características. Muchos compuestos orgánicos contienen más de un grupo funcional.



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.

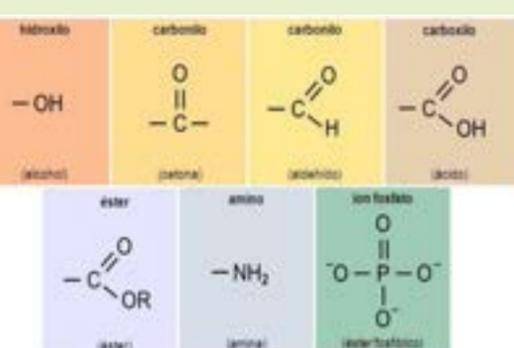
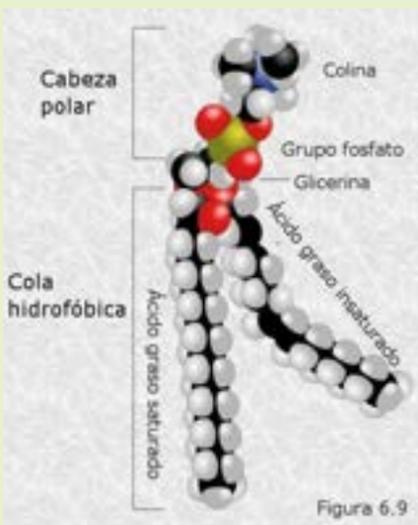


Los grupos funcionales se pueden clasificar como **hidrofóbicos** o **hidrofílicos** por sus características de carga y polaridad.



Grupo hidrofóbico

El único grupo hidrofóbico que se muestra abajo es el grupo metilo, que es no polar. Los otros seis grupos funcionales restantes en la tabla tienen diferentes grados de carácter hidrofílico. Un ejemplo de un grupo fuertemente hidrofílico 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

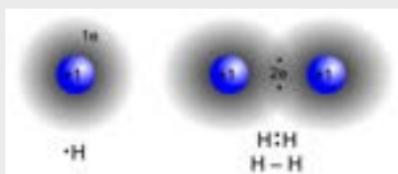
El enlace covalente entre dos átomos puede ser polar o apolar. Esto depende del tipo de átomos que lo conforman: si los átomos son iguales, el enlace será apolar. Pero, si los átomos son diferentes, el enlace estará polarizado hacia el átomo más electronegativo, ya que será el que atraiga el par de electrones con más fuerza.



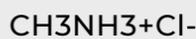
Podemos representar esta polarización del enlace por medio de una flecha, que SIEMPRE apunta al átomo más electronegativo.

MOLÉCULAS CON MÁS DE DOS ÁTOMOS.

El momento dipolar dependerá de la polaridad de todos sus enlaces y de la geometría molecular. La presencia de enlaces polares NO IMPLICA necesariamente que la molécula sea polar.



Enlaces con polaridad muy variada.

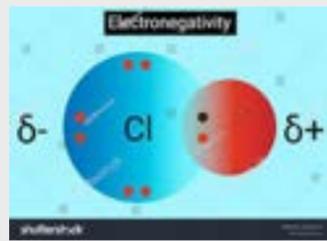


La polaridad de un enlace aumenta a medida que la electronegatividad de uno de los átomos implicados en un enlace covalente aumenta.

El momento dipolar del enlace es una medida de la polaridad de un enlace.

Enlace no polar

Cuando dos átomos comparten por igual los dos electrones del enlace covalente se dice que el enlace es no polar, como el enlace de la molécula de hidrógeno o el enlace carbono carbono del etano. La mayor parte de los enlaces covalentes están formados por dos átomos diferentes, de manera que los electrones del enlace son atraídos con mayor intensidad por uno de los dos átomos que forman el enlace.



La electronegatividad se define como la tendencia del núcleo atómico a la atracción de electrones.

POLARIDAD

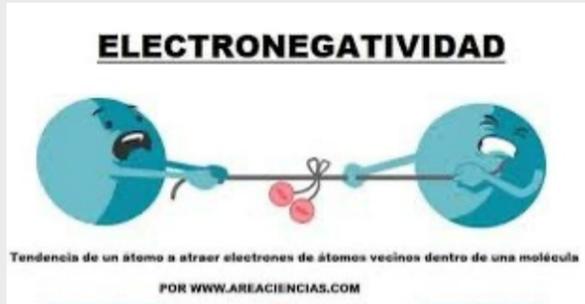
Se indica con una flecha que dirige su punta hacia el extremo negativo del enlace polar y un signo más en el extremo positivo del enlace. El símbolo δ^+ quiere decir una pequeña cantidad de carga positiva y el símbolo δ^- quiere decir una pequeña cantidad de carga negativa.



Pauling

Desarrolló una escala de electronegatividades relativas para la mayoría de los átomos.

| Grupos Funcionales | | | |
|----------------------------|-----------------------------------|---|---|
| Nombre del Grupo Funcional | Estructura General | Estructura Ejemplo | Nombre Bréfico |
| Alcano | —C— | $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_3$ | propano |
| Alqueno | C=C | $\text{CH}_2\text{=CH—CH}_3$ | propeno |
| Alquino | $\text{—C}\equiv\text{C—}$ | $\text{CH}_3\text{—C}\equiv\text{CH}$ | propino |
| Alcohol | R—OH | $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—OH}$ | propanol |
| Éter | R—O—R | $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—O—CH}_2\text{—CH}_3$ | diétil éter |
| Aldehído | R—C(=O)—H | $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CHO}$ | propenal |
| Cetona | R—C(=O)—R | $\text{CH}_3\text{—C(=O)—CH}_3$ | Propanona o acetona (o metilcetona -disolvente común o reduciendo-) |
| Ácido carboxílico | R—C(=O)—OH | $\text{CH}_3\text{—C(=O)—OH}$ | ácido acético |
| Éster | R—O—C(=O)—R | $\text{CH}_3\text{—O—C(=O)—CH}_3$ | acetato de metilo o acetato de metilo |
| Amino | R—NH_2 o R—NH—R | $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—NH}_2$ | propilamina |
| Ácido | R—N(=O)—R | $\text{CH}_3\text{—N(=O)—CH}_3$ | metil nitrosado o metil nitrito |



En un enlace covalente el átomo con mayor electronegatividad es el extremo negativo del dipolo, tal y como se indica en las siguientes estructuras.