

# Instituto Politécnico

Universidad Nacional de Rosario Universidad Nacional de

## Química

## Orgánica I

## 4º Año

### Química Orgánica

Dpto. de Tecnología de los Alimentos

Masterización: RECURSOS PEDAGÓGICOS

Cód. 22401-24

Julieta Ledesma  
Lucas A. Giraud





<b>INTRODUCCIÓN: LA QUÍMICA ORGÁNICA</b> .....	<b>3</b>
<b>UNIDAD I: LA TEORÍA ESTRUCTURAL</b> .....	<b>6</b>
1.1. La teoría estructural o “cómo se unen los átomos para formar moléculas” .....	6
1.2. El enlace químico .....	6
1.3. Mecánica cuántica y orbitales atómicos .....	9
1.4. Orbitales moleculares y enlace covalente .....	12
1.4.1. El enlace Sigma ( $\sigma$ ) .....	12
1.4.2. El enlace Pi ( $\pi$ ) .....	16
1.5. Guía de estudio .....	18
<b>UNIDAD II: GEOMETRÍA Y REPRESENTACIÓN DE LAS MOLÉCULAS ORGÁNICAS</b> .....	<b>19</b>
2.1. Hibridación de orbitales atómicos .....	19
2.2. Orbitales híbridos $sp^3$ .....	19
2.2.1. La molécula de metano .....	22
2.2.2. Distorsiones de la geometría tetraédrica .....	24
2.3. Orbitales híbridos $sp^2$ .....	25
2.3.1. La molécula de eteno o etileno .....	26
2.4. Orbitales híbridos $sp$ .....	27
2.4.1. La molécula de etino o acetileno .....	29
2.5. Resumen .....	30
2.6. Fórmulas estructurales .....	30
2.6.1. Fórmula desarrollada o de Lewis .....	31
2.6.2. Fórmula semidesarrollada o semicondensada .....	32
2.6.3. Fórmula condensada .....	32
2.6.4. Fórmula de esqueleto .....	33
2.6.5. Fórmula tridimensional o de cuñas .....	35
2.7. Conceptos básicos de Estereoquímica .....	35
2.7.1. Isómeros constitucionales o estructurales .....	36
2.7.2. Estereoisómeros .....	36
2.8. Guía de estudio .....	39

<b>Unidad III: Estructura molecular, fuerzas intermoleculares y propiedades físicas de las sustancias orgánicas .....</b>	<b>43</b>
3.1. Polaridad de enlace y momento dipolar .....	43
3.2. Momento dipolar resultante: Moléculas polares y apolares .....	45
3.3. Fuerzas intermoleculares.....	46
3.3.1. Fuerzas dipolo-dipolo .....	46
3.3.2. Puentes de Hidrógeno.....	47
3.3.3. Fuerzas de London .....	48
3.4. Propiedades físicas de las sustancias orgánicas.....	50
3.4.1. Punto de fusión .....	50
3.4.2. Punto de ebullición .....	51
3.4.3. Solubilidad.....	52
3.5. Guía de estudio.....	53
<b>Bibliografía.....</b>	<b>54</b>



## INTRODUCCIÓN: LA QUÍMICA ORGÁNICA

### *¿Qué estudia la Química Orgánica?*

**La química orgánica es la química de los compuestos del carbono.**

Conforme la química avanzaba como ciencia, resultó evidente para quienes se dedicaban a su estudio que el carbono era un elemento muy particular y convenía distinguirlo de los otros elementos de la Tabla Periódica.

El carbono era el constituyente común de los componentes que, una vez aislados y purificados, se obtenían de plantas y animales, es decir, la química del carbono estaba asociada de una manera especial a la vida.

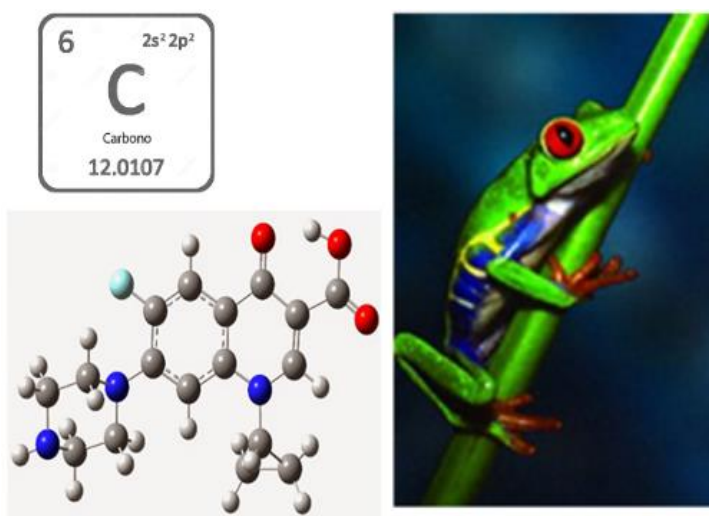
De esta forma, se dividió a los compuestos químicos en dos clases: inorgánicos y orgánicos. Los compuestos inorgánicos procedían de los minerales, y los orgánicos eran aquellos que se obtenían de fuentes vegetales y animales, o sea, de materiales producidos por **organismos vivos**.

Sin embargo, con el tiempo, gran cantidad y variedad de compuestos del carbono fueron sintetizados directamente en el laboratorio, partiendo de sustancias inorgánicas como carbonatos y cianuros, quedando establecido que estos compuestos no tenían necesariamente que proceder de fuentes vivas. Es por ello que, en la actualidad, se consideran compuestos orgánicos a todos aquellos que contienen carbono en su estructura, además de otros elementos como hidrógeno, oxígeno o nitrógeno, independientemente de su procedencia, siendo entonces la química orgánica, la rama de la química que estudia su estructura y transformaciones.

*¿Qué justifica que estudiemos a los compuestos del carbono separados de aquellos formados por los otros elementos de la tabla periódica?*

En principio, porque hay muchísimos compuestos del carbono y sus moléculas pueden ser muy grandes y complejas. En efecto, el número de compuestos del carbono es muchas veces mayor que el número de los que no lo contienen y sus moléculas pueden estar formadas por miles de átomos de C que se estructuran en cadenas o anillos que, a su vez, pueden unirse y/o presentar ramificaciones.

En nuestra asignatura, estudiaremos estas estructuras moleculares y cómo se relacionan con las propiedades físicas y químicas de las sustancias que constituyen, con el fin de poder comprender su comportamiento y función en los diferentes sistemas que componen y desarrollar procedimientos para determinar o sintetizar compuestos de interés.



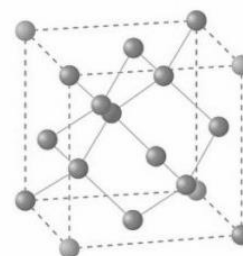
*¿Qué hace que el carbono pueda formar tantos y diversos compuestos?*

La característica principal que tiene el átomo de carbono, y que lo diferencia del resto de los elementos químicos, es su capacidad de formar enlaces fuertes con otros átomos de carbono y con una gran variedad de elementos de la tabla periódica, formando largas cadenas con ramificaciones o anillos muy estables. Esta propiedad, la concatenación, conduce a un número casi infinito de compuestos de carbono y se explica a partir de que sus átomos pueden formar cuatro enlaces covalentes, lo que se denomina tetravalencia, que pueden ser simples, dobles o triples.

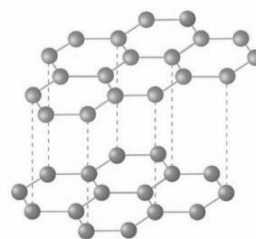
Como consecuencia de las propiedades de sus átomos, en la naturaleza, el carbono se encuentra en varias formas alotrópicas. Entre ellas, el diamante, el grafito y el fullereno, son tres de estas posibles formas alotrópicas que presentan propiedades físicas que difieren considerablemente.



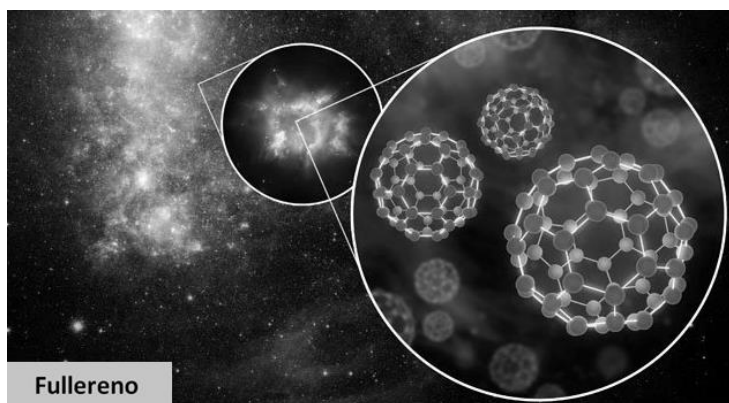
El diamante es incoloro y es el alótropo más duro que se conoce, cada átomo está unido a otros cuatro en una estructura tridimensional.



El grafito presenta un color negro y está formado por capas compuestas por anillos hexagonales de átomos de carbono. Las capas pueden deslizarse una sobre la otra, otorgándole a esta sustancia propiedades lubricantes.



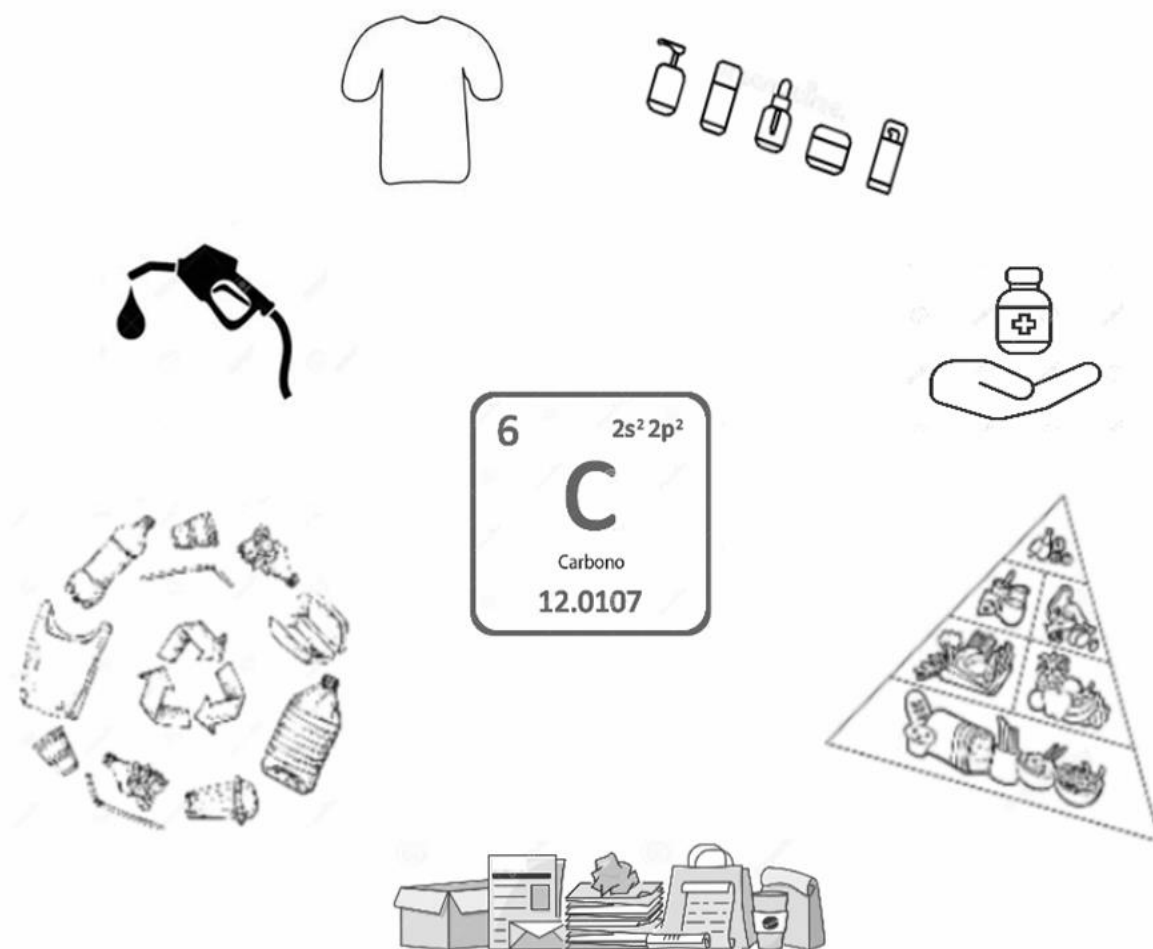
Por su parte, el fullereno es una sustancia de color azul de gran estabilidad que se encuentra en el polvo interestelar del espacio. Sus moléculas están formadas por 60 átomos de carbono y tienen forma de balón de fútbol. Un balón de fútbol que está formado por 20 hexágonos y 12 pentágonos en cuyos vértices se ubican los átomos de carbono.





### ¿Por qué interesa estudiar química orgánica?

La química orgánica está presente en prácticamente todos los aspectos de nuestra vida y resulta un campo de estudio inmensamente importante para la ciencia, la tecnología y la industria. No solo es la química de los organismos vivos, fundamental para la biología y la medicina, si no también de los cosméticos y los combustibles, del papel, los colorantes y las pinturas, de los plásticos, los neumáticos y los fitosanitarios; es la química de nuestro vestuario, de los productos de limpieza que usamos en nuestros hogares y la de nuestros alimentos.



Respecto de estos últimos, los alimentos que consume la humanidad, diversos compuestos del carbono, tales como aminoácidos, proteínas, hidratos de carbono y lípidos son, junto con el agua, sus componentes mayoritarios. Es por ello que el estudio de la química orgánica es indispensable para aprender sobre la composición de los alimentos y las transformaciones químicas involucradas en su elaboración, conservación y deterioro, así como también en los procesos comprendidos en la nutrición humana, cuestiones que sin dudas resultan fundamentales para la formación de futuras técnicas y técnicos en tecnología de los alimentos.

### UNIDAD I: LA TEORÍA ESTRUCTURAL

#### 1.1. La teoría estructural o “cómo se unen los átomos para formar moléculas”

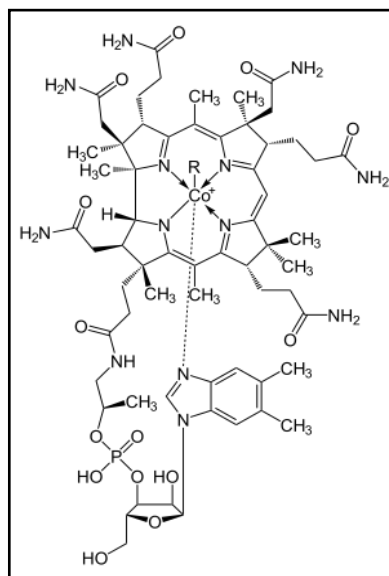
Para introducirnos al estudio de la química orgánica que, como se explicó, constituye un campo de conocimientos de enorme extensión y complejidad, contamos con un mapa que nos permitirá orientarnos en nuestro recorrido: **la teoría estructural**.

Esta teoría, construida sobre evidencia científica obtenida por químicas y químicos a partir de innumerables experimentos realizados con cientos de miles de compuestos, es el marco de ideas que nos permitirá comprender y explicar los fenómenos asociados a los compuestos orgánicos que estudiaremos.

La teoría estructural se ocupa básicamente de cómo se unen los átomos para formar moléculas, dando cuenta del orden en que éstos se juntan, de las formas y tamaños que adoptan las moléculas que generan y el modo en el que los electrones los mantienen unidos y se distribuyen a su alrededor.

En nuestro estudio de la química orgánica, será de gran importancia representar a las moléculas con dibujos o modelos (a veces varios para una misma molécula). En estas representaciones, los núcleos atómicos estarán normalmente consignados con su símbolo químico o una esfera y los electrones que los unen por puntos, líneas o figuras de geometría globular llamadas orbitales.

Interpretadas a partir de la teoría, estas representaciones de las moléculas, denominadas **fórmulas estructurales**, nos revelarán bastante acerca de las sustancias que representan: sus propiedades físicas -temperaturas de cambio de fase, densidad, clase de solventes en los que se disolverán, viscosidad o color-, las sustancias con las que reaccionan químicamente y la velocidad a la que lo hacen.



Teniendo en cuenta lo antes discutido, para emprender nuestro estudio de la teoría estructural y la química orgánica, resulta claro que debemos comenzar estudiando los enlaces químicos, es decir, las fuerzas que mantienen unidos a los átomos en una molécula. A continuación, nos ocuparemos de este tema, haciendo foco en el enlace covalente dado que es el que caracteriza a las moléculas orgánicas.

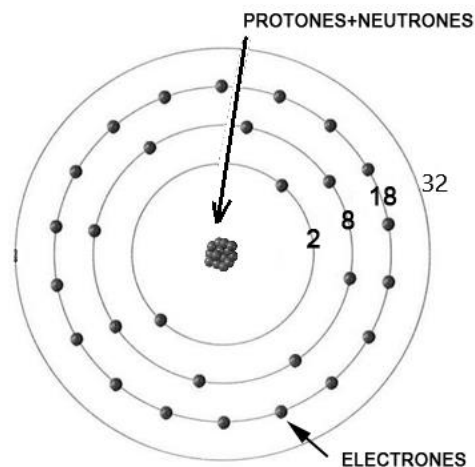
#### 1.2. El enlace químico

Los compuestos químicos se dividen en dos grandes grupos, según la naturaleza de los enlaces que unen a los átomos que los forman: **los compuestos iónicos y los covalentes**.

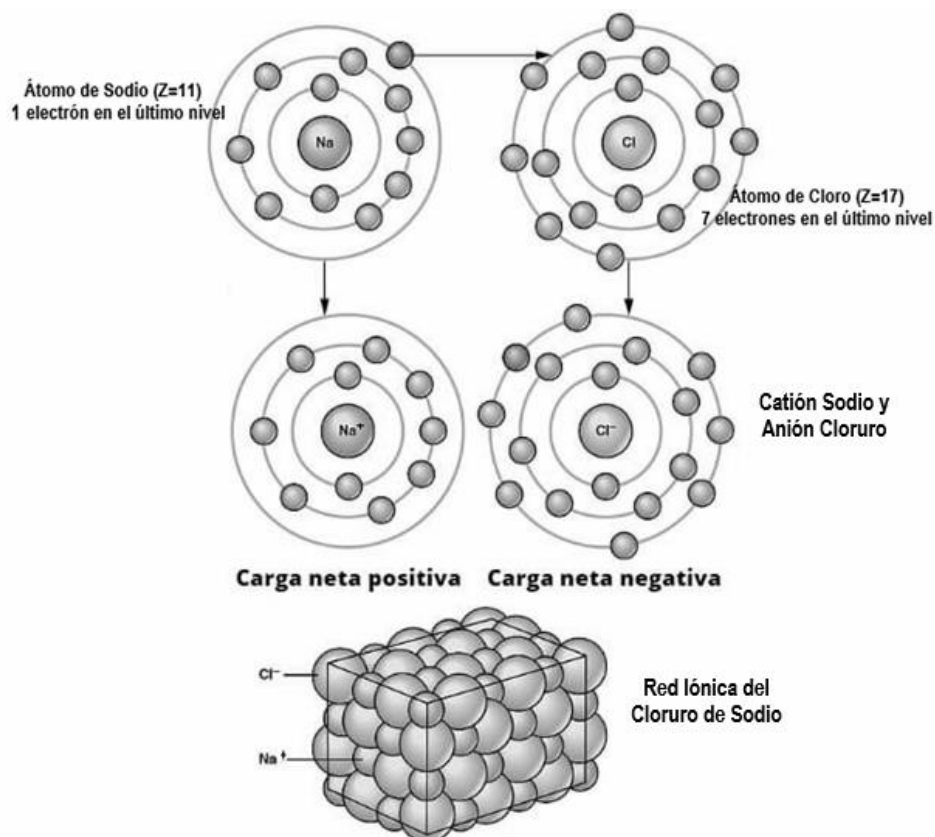
Fue en la década de 1910 que se describieron estas dos clases de enlaces químicos: el iónico presentado por Walther Kossel (Alemania) y el enlace covalente postulado por Gilbert Lewis (EEUU). Ambos científicos se basaron en un modelo atómico consistente en un núcleo de carga positiva rodeado por electrones ordenados en capas concéntricas o niveles de energía, adoptando lo que se denomina una configuración electrónica característica. Estas capas o



niveles tienen un máximo de electrones que pueden alojar: dos la primera, ocho la segunda, dieciocho la tercera y treinta y dos a partir de la cuarta. Aquellos átomos que completan la capa más externa o nivel más alto, como los gases nobles, adquieren la máxima estabilidad.

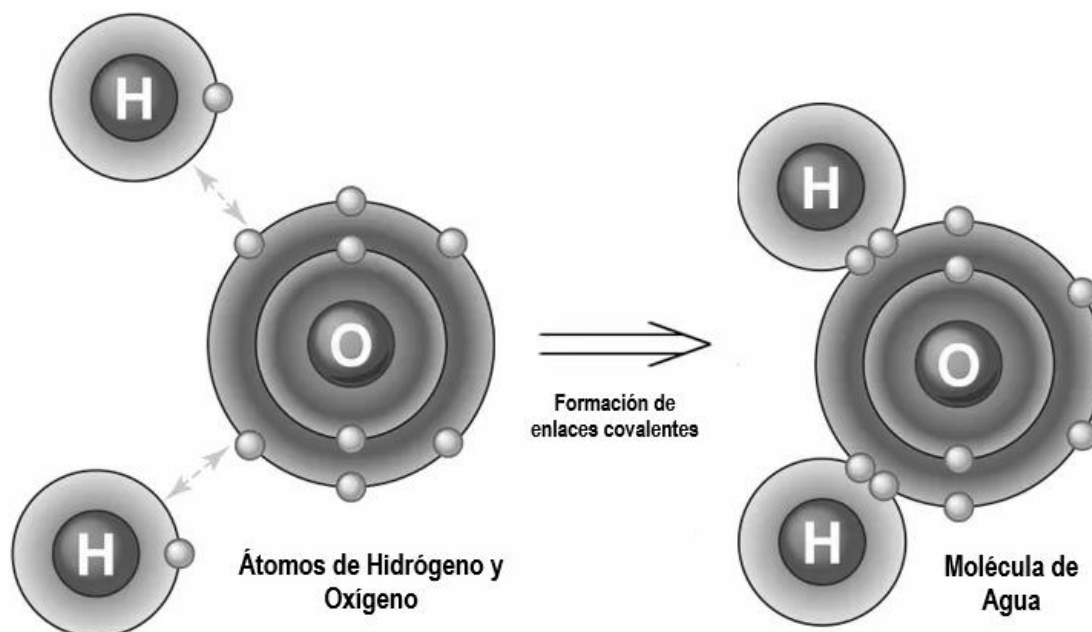


Desde esta perspectiva, tanto los enlaces iónicos como los covalentes surgen de la tendencia de los átomos a alcanzar esta configuración electrónica estable característica de los gases nobles. Los **compuestos iónicos** están constituidos por **iones** que son unidades de materia que presentan cargas y se encuentran unidos por fuerzas electrostáticas formando estructuras tridimensionales denominadas redes iónicas. En la imagen a continuación, se esquematiza la formación del compuesto iónico *Cloruro de Sodio* a partir de átomos neutros de *Sodio* y *Cloro*.

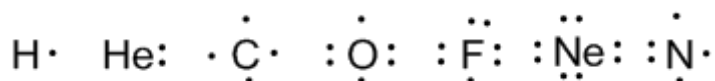


Por su parte, en **los compuestos covalentes**, los átomos se encuentran unidos por una compartición de pares de electrones y las unidades estructurales formadas, que no presentan carga eléctrica, se denominan **moléculas**. Los electrones compartidos se llaman electrones enlazantes y los electrones de valencia que no son compartidos se llaman electrones no enlazantes.

A continuación, se ilustra la formación de una molécula de *Agua* a partir de la unión covalente de dos átomos de *Hidrógeno* con uno de *Oxígeno*.



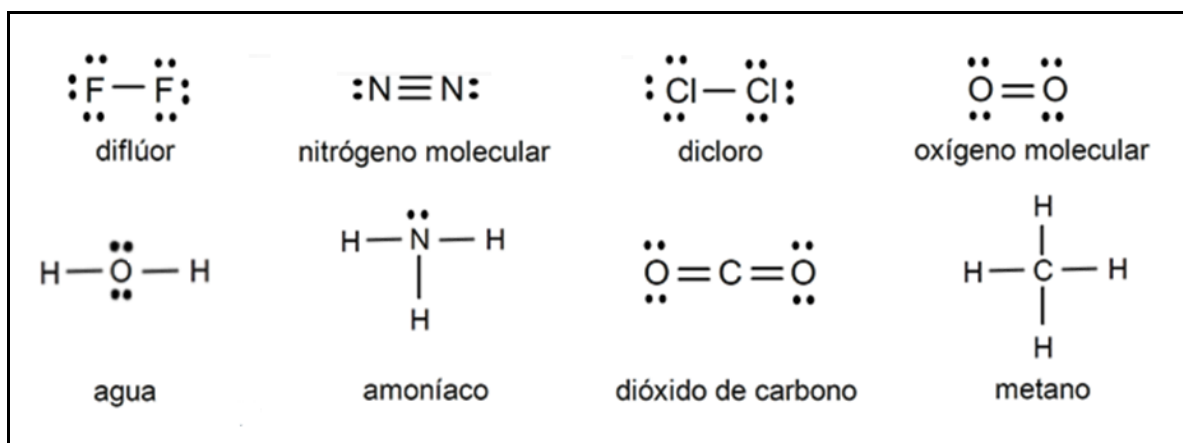
Para representar a los átomos, moléculas y iones, Lewis propuso la utilización de representaciones planas, hoy llamadas "**Estructuras de Lewis**", en las que se muestran todos los electrones de la capa de valencia de cada uno de sus átomos. Se utiliza un punto para representar a un electrón mientras que, el núcleo y las capas electrónicas internas vienen representadas por el símbolo químico del elemento.



Estructura de Lewis de algunos elementos de la tabla periódica

En estas representaciones, los enlaces covalentes entre dos átomos se dibujan mediante dos puntos o una línea que representan a los pares de electrones compartidos. Los electrones no compartidos también se representan alrededor del símbolo del átomo. Además, la estructura de Lewis de una determinada sustancia debe dar cuenta de que los átomos en una molécula o ion presentan su capa electrónica más externa con 8 electrones. Esta configuración se llama **octeto electrónico** y se dice que los elementos que cumplen con ella presentan una capa externa cerrada.

A continuación, se presentan las estructuras de Lewis de algunas moléculas sencillas:



Vale mencionar que existen varias excepciones a la regla del octeto, por ejemplo algunos átomos como el hidrógeno, el helio y el berilio son estables con 2 electrones; otros átomos logran estabilizarse quedando con una capa externa abierta (menos de ocho electrones) y otros elementos, del periodo 4 en adelante, pueden extender su octeto.

Cuándo se comparte un par de electrones entre dos átomos se forma un enlace simple o sencillo. Sin embargo, muchas moléculas tienen átomos que comparten dos o incluso tres pares de electrones formándose enlaces múltiples. Cuándo se comparten dos pares se dice que se forma un enlace covalente doble y cuando se comparten tres se forma un enlace triple.

### 1.3. Mecánica cuántica y orbitales atómicos

En la década de 1920, producto de avances científicos en la física y la química, toma forma la teoría conocida como **mecánica cuántica**, cuya formulación más útil para la química fue propuesta por Erwin Schrödinger (Alemania) quien desarrolló expresiones matemáticas para describir el movimiento de un electrón en la región que rodea al núcleo atómico en función de su energía. Estas expresiones, llamadas **ecuaciones de onda**, se basan en la idea de que los electrones tienen una naturaleza dual, presentando tanto propiedades de partículas como de ondas.

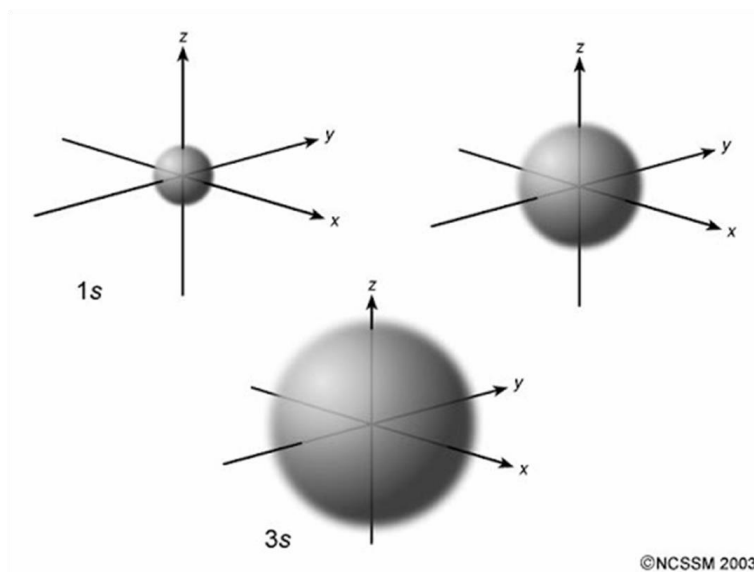
Las ecuaciones de onda de Schrödinger incorporan el **principio de incertidumbre** propuesto en la misma década por otro científico alemán, Werner Heisenberg, que establece que no es posible predecir exactamente dónde va a encontrarse un electrón en determinado instante, por lo que **no permiten dibujar la órbita precisa que estos describirían en torno al núcleo**. En cambio, **las ecuaciones de onda sí permiten determinar la probabilidad de encontrar un electrón en determinado lugar del espacio**.

A partir de esto último, **aplicando la ecuación de onda a diferentes puntos del espacio que rodea al núcleo atómico es posible determinar la región en la que hay una probabilidad finita de encontrar un electrón**. A esta región se la denomina **orbital atómico (OA)** y se le asigna un signo positivo o negativo para indicar la fase instantánea de la función de onda.

***Orbital atómico: región del espacio que rodea al núcleo atómico en la que es probable encontrar un electrón.***

Las formas y posiciones relativas de los orbitales atómicos resultan de gran interés para la química puesto que, como estudiaremos, determinan la disposición espacial de los átomos en una molécula y ayudan a explicar y a predecir su comportamiento químico.

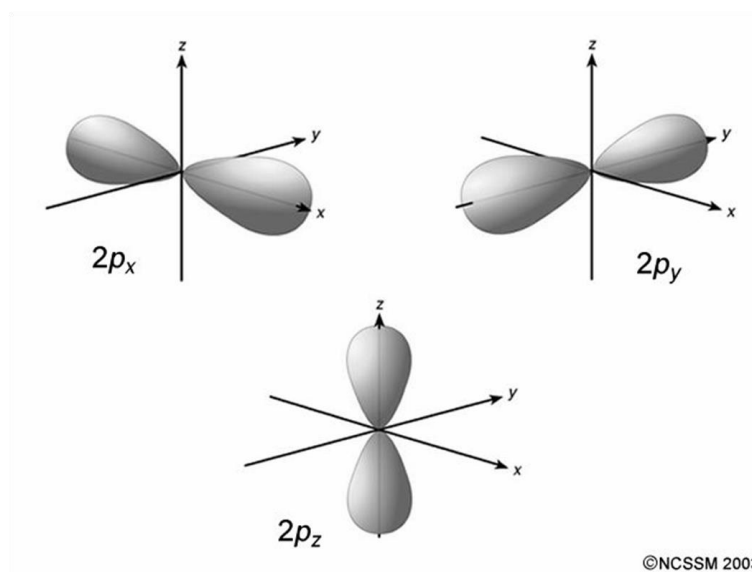
El tipo particular de orbital que ocupa un electrón depende de su energía. El orbital atómico de menor energía es el denominado “**1s**” y posee simetría esférica (la región tiene forma de esfera) como todos los orbitales s. El orbital atómico siguiente en energía es el “**2s**”, este orbital también es esférico, pero de mayor tamaño que el 1s, y a su vez está en un nivel de energía más elevado.



Representación de los orbitales atómicos 1s, 2s y 3s

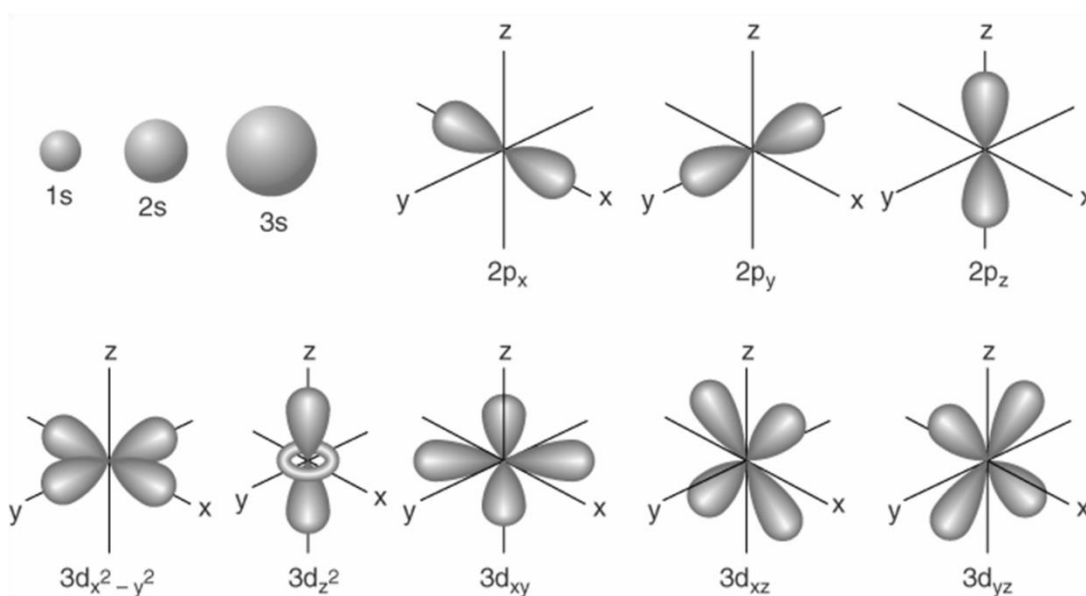
Los orbitales siguientes en energía son los “**2p**”. Estos son 3 orbitales idénticos en energía (degenerados), orientados ortogonalmente entre sí y designados según los ejes de coordenadas: **2p<sub>x</sub>**, **2p<sub>y</sub>** y **2p<sub>z</sub>**.

Un **orbital p** tiene una simetría formada por dos lóbulos que están en lados opuestos al núcleo. En la unión de ambos lóbulos la probabilidad de encontrar un electrón es nula. Una región donde la probabilidad de encontrar un electrón es cero se denomina **nodo**. A cada lóbulo de un orbital p se le asigna un signo matemático ( $\pm$ ) diferente para indicar que la función de onda cambia de fase al pasar por el plano nodal.



Representación de los orbitales atómicos  $2p_x$ ,  $2p_y$  y  $2p_z$ .

A los orbitales s y p, debemos agregar cinco orbitales “d” y siete “f” que presentan geometrías más complejas y se encuentran a partir de los niveles tres y cuatro de la configuración electrónica. En la imagen a continuación, se presentan las geometrías de los orbitales s, p y d.



A fin de estudiar la geometría de las moléculas del carbono con el alcance previsto en esta asignatura, de los orbitales atómicos hasta aquí mencionados, recurriremos principalmente a las representaciones de los orbitales s y p.

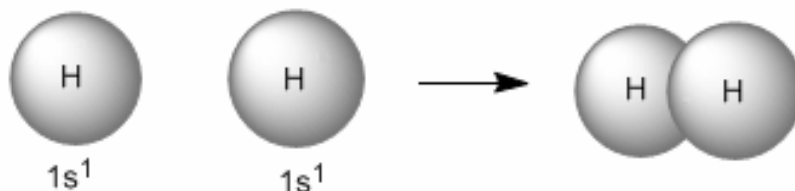
### 1.4. Orbitales moleculares y enlace covalente

La formación de un enlace covalente desde el punto de vista de Lewis se da mediante la compartición de electrones; sin embargo, este enlace se puede comprender de manera más precisa desde la **teoría de los orbitales moleculares basada en la mecánica cuántica**, específicamente en las ecuaciones de onda de Schrödinger, que permiten explicar de manera satisfactoria la geometría de las moléculas.

A continuación, abordaremos los fundamentos de esta teoría.

#### 1.4.1. El enlace Sigma ( $\sigma$ )

Para introducirnos en el tema, analicemos la formación de una molécula de hidrógeno ( $H_2$ ): Esta molécula está formada por dos átomos de hidrógeno, cada uno de ellos con un electrón en su orbital 1s. Cuando los átomos se aproximan, los orbitales atómicos se superponen (o solapan) en el espacio, reforzándose.



Formación de la molécula de  $H_2$  mediante el solapamiento de dos orbitales s.

Como consecuencia del solapamiento de los orbitales atómicos s, se forma un nuevo orbital denominado **orbital molecular  $\sigma$  (OM  $\sigma$ )**, el cual se encuentra entre los núcleos atómicos y contiene dos electrones (cada electrón compartido por un átomo de H). Este nuevo orbital, que pertenece a la molécula, presenta una geometría cilíndrica respecto al eje internuclear (eje imaginario que intercepta a ambos núcleos atómicos) y un estado de menor energía que los orbitales atómicos sin solaparse; por lo tanto, la formación de la molécula de  $H_2$  conduce a un estado más estable que los 2 átomos de H sin combinarse.

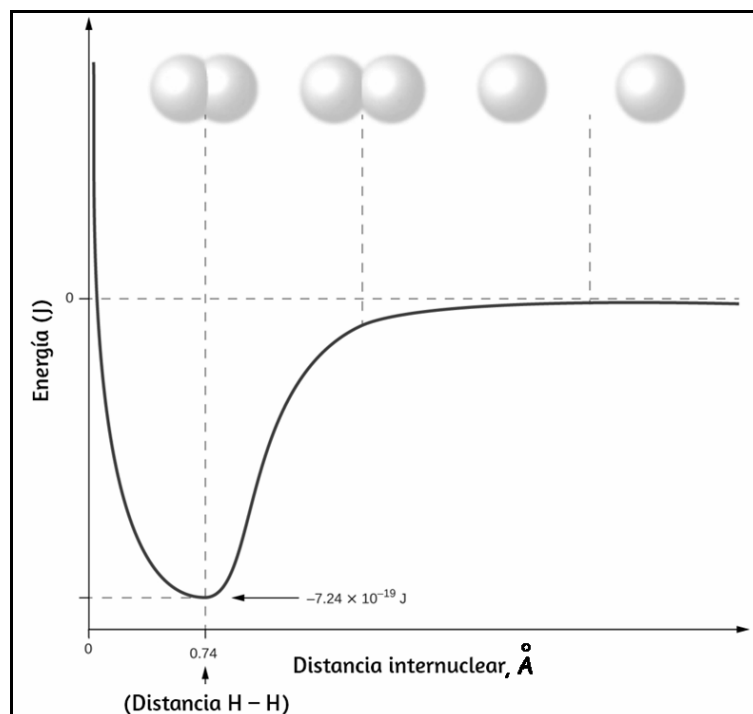


Representaciones del OM  $\sigma$  formado por el solapamiento de dos OA s.

La máxima estabilidad del sistema es alcanzada cuando se establece una distancia de equilibrio en la que los orbitales atómicos se acercan lo suficiente para lograr un buen solapamiento, pero no tanto como para que los núcleos atómicos se repelan entre sí. Esa **distancia óptima donde**

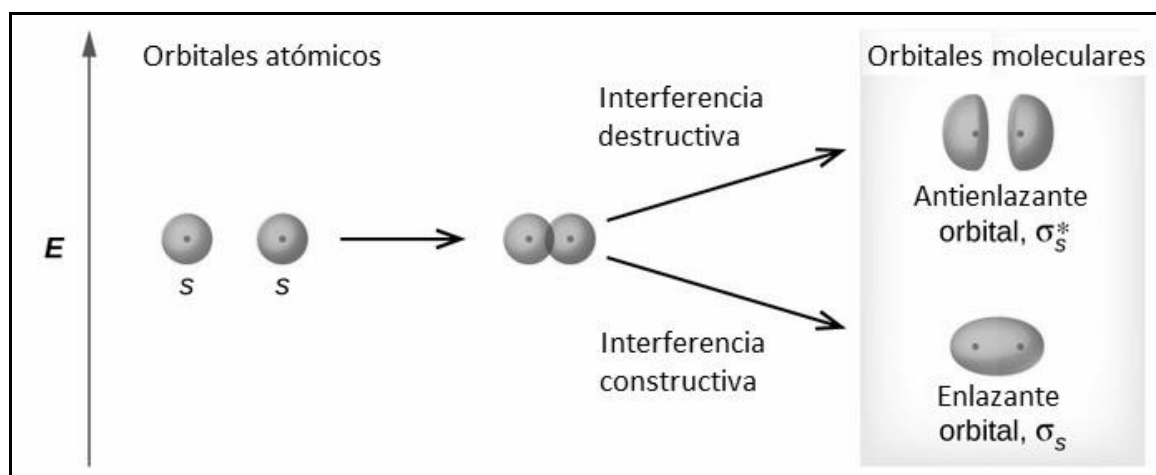


la energía tiene un mínimo, se denomina **longitud de enlace** y en el caso de la molécula de hidrógeno es de  $0,74 \text{ \AA}$  ( $0,74 \times 10^{-10} \text{ m}$ ).



Longitud de enlace en la molécula de  $\text{H}_2$ .

La formación del **OM  $\sigma$  de enlace** sucede cuando los orbitales atómicos que se combinan están en fase (fenómeno interferencia constructiva de ondas). Sin embargo, la otra combinación posible entre dos orbitales atómicos es cuando no están en fase (interferencia destructiva, signos matemáticos diferentes) y se genera una región nodal donde no hay densidad electrónica. Cuando esto sucede, los núcleos se repelen y se genera un **OM  $\sigma^*$  de antienlace**. Este OM es energéticamente mayor que los OA iniciales y que el OM  $\sigma$  y por lo tanto, menos probable.



Formación de un OM  $\sigma_s$  de enlace y de un OM  $\sigma_s^*$  de antienlace.

Siempre que se combinan dos orbitales atómicos se generan dos orbitales moleculares, uno de enlace y otro de antienlace. Un OM enlazante tiene menor energía y mayor estabilidad que los orbitales atómicos de los cuales proviene. Un OM antienlazante tiene mayor energía y menor estabilidad que los orbitales atómicos que lo originan.

Al igual que en los OA, **cada OM puede albergar como máximo 2 electrones con espines opuestos. Cuando se llena un OM enlazante se genera el enlace covalente.**

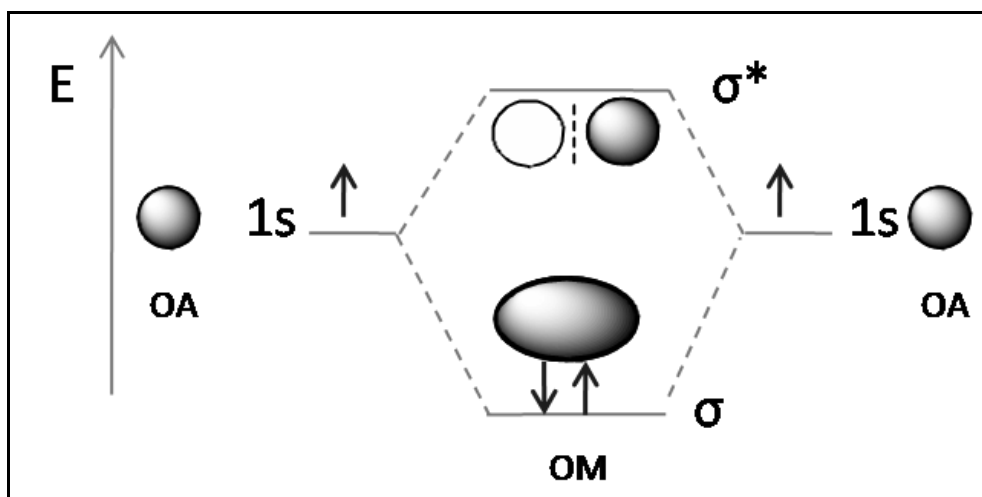
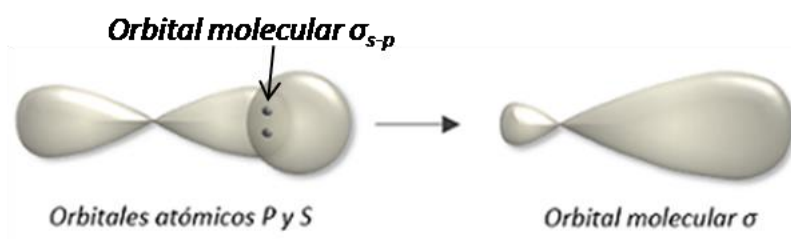


Diagrama energético de los orbitales enlazante y antienlazante en la formación del H<sub>2</sub>.

Vale aclarar que el solapamiento de dos OA de tipo s no es la única manera en la que se genera un enlace  $\sigma$ . Este tipo de enlace también puede generarse a partir del solapamiento frontal de un orbital s y un orbital p ( $\sigma_{s-p}$ ) y por el solapamiento frontal de dos orbitales p ( $\sigma_{p-p}$ ), como se muestra a continuación:

**Orbital molecular  $\sigma_{s-p}$**  → se forma a partir del solapamiento de un **orbital atómico s** y uno **p**:



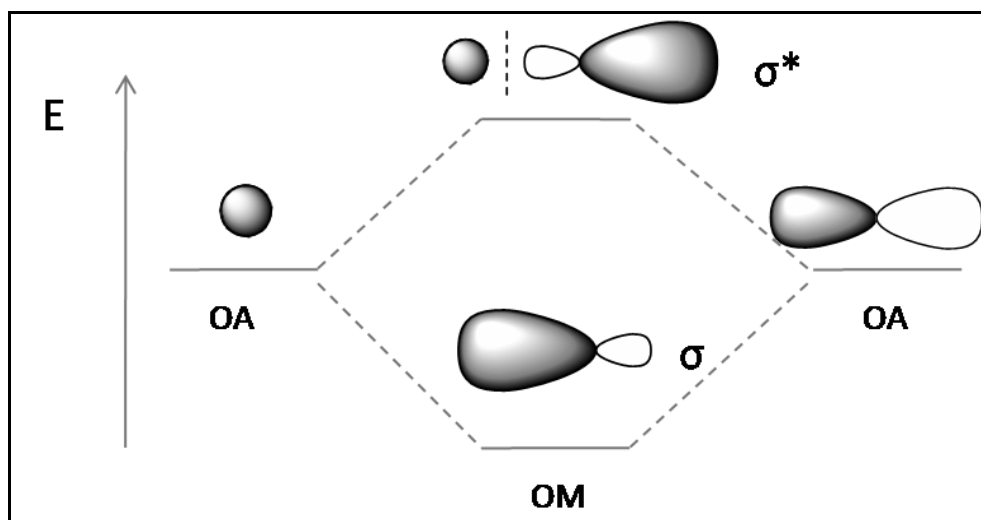


Diagrama energético de los orbitales en la formación de un enlace  $\sigma_{s-p}$ .

Orbital molecular  $\sigma_{p-p}$  → se forma a partir del solapamiento frontal de dos orbitales atómicos p:

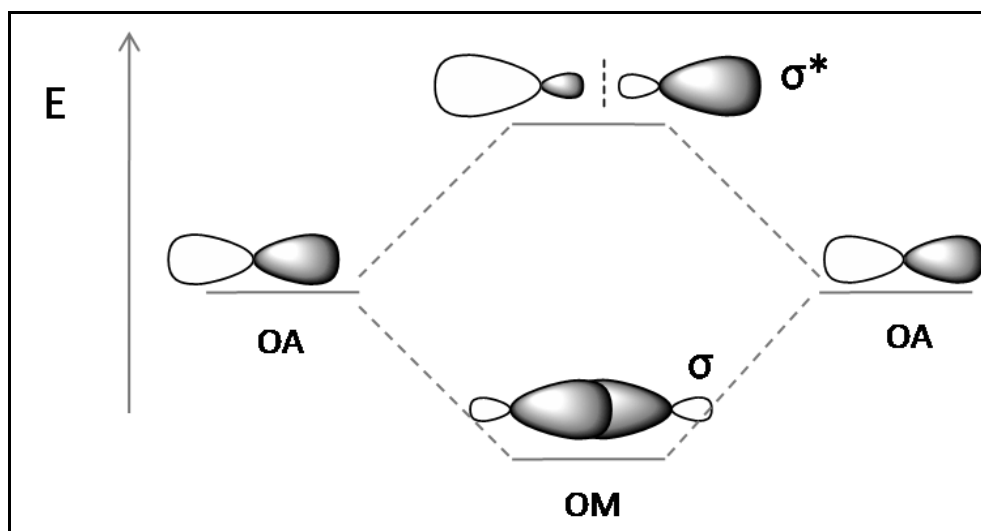
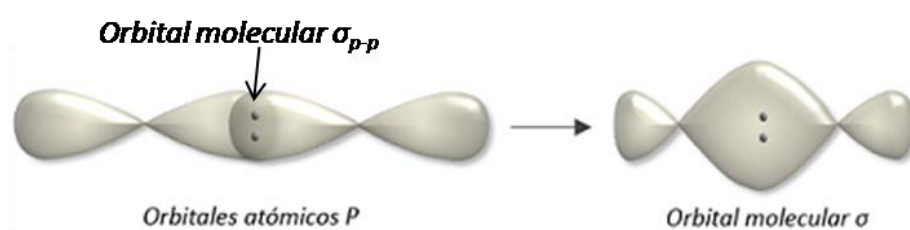
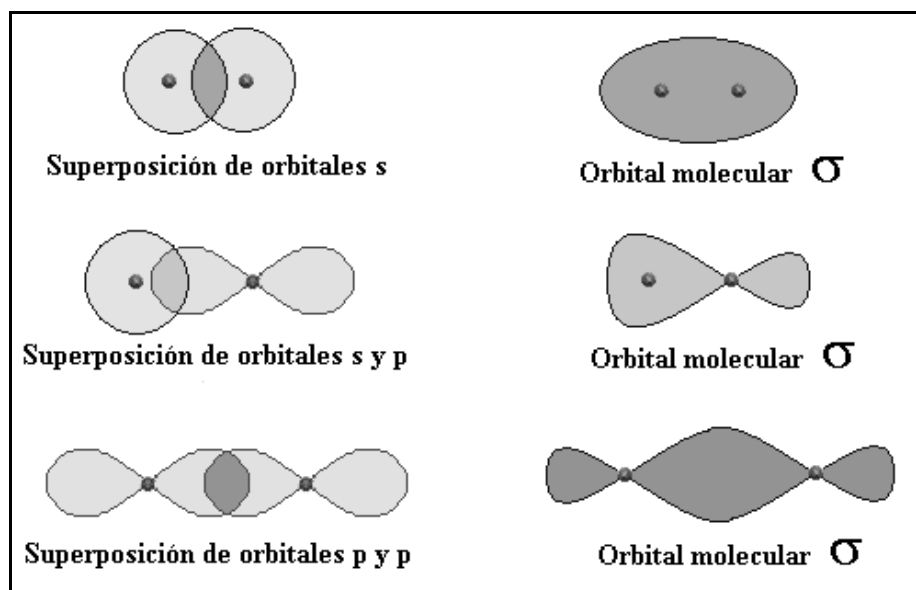


Diagrama energético de los orbitales en la formación de un enlace  $\sigma_{p-p}$ .

En síntesis, el enlace sigma ( $\sigma$ ) es una unión covalente entre dos átomos que se caracteriza por la formación de un orbital molecular de tipo  $\sigma$  que se genera a partir de la superposición directa o frontal de dos orbitales atómicos; es el enlace covalente más fuerte y determina la geometría de la molécula.

A modo de resumen, se incluye la siguiente imagen:



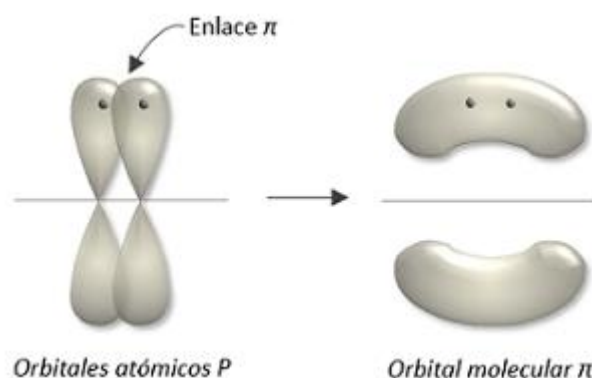
Formación de Orbitales Moleculares  $\sigma$  a partir de diferentes combinaciones de OA.

### 1.4.2. El enlace Pi ( $\pi$ )

El **enlace  $\pi$**  es una unión covalente entre dos átomos que se caracteriza por la formación de un orbital molecular de tipo  $\pi$  que resulta del traslape o solapamiento de dos orbitales atómicos **p** paralelos. Estos orbitales paralelos y orientados perpendicularmente al eje internuclear se solapan lateralmente y la mayor parte de la densidad electrónica se concentra arriba y debajo de la línea que conecta a los núcleos.

Si los orbitales p se encuentran en fase generan un **OM  $\pi$  enlazante** y si no están en fase generan un **OM  $\pi^*$  antienlazante**.

**Orbital molecular  $\pi_p$**  → se produce a partir de la fusión de orbitales atómicos p paralelos:



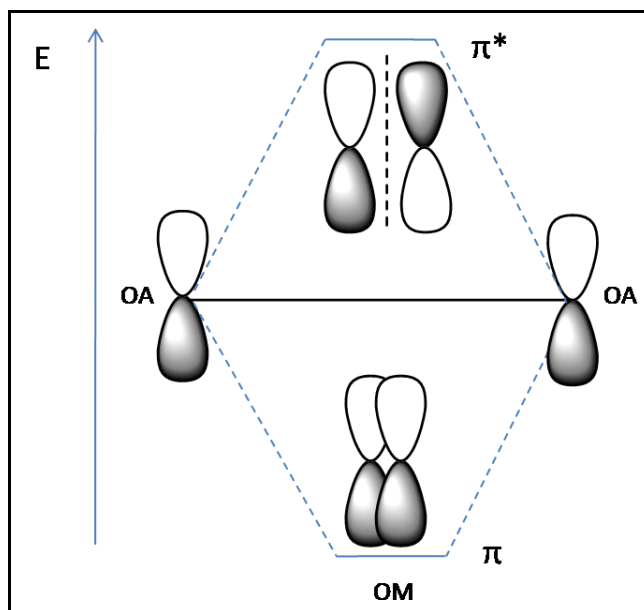
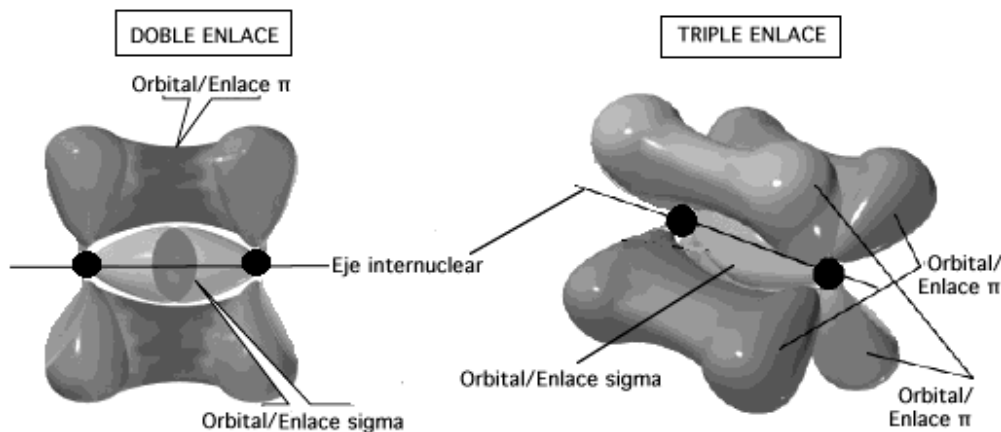


Diagrama energético de los orbitales en la formación de un enlace  $\pi_{p-p}$ .

Los enlaces  $\pi_p$  se forman siempre después del enlace sigma; es decir corresponden al segundo o tercer enlace formado entre dos átomos que se unen mediante uniones covalentes dobles o triples respectivamente.



Representación de un doble y triple enlace.<sup>1</sup>

En la imagen superior, sólo se indican los orbitales de enlace entre dos átomos genéricos. Por su parte, los dos lóbulos que forman el orbital molecular  $\pi_p$  de enlace constituyen un único enlace covalente.

A los fines de representar y estudiar la geometría de las moléculas orgánicas, en este curso solamente recurriremos a las representaciones de los orbitales moleculares de enlace y no tendremos en cuenta los de antienlace.

<sup>1</sup> Imagen tomada de la página web "Quim-Formativa" de Pedro E. Laboy.

### 1.5. Guía de estudio

- Indica qué tipo de enlace se formaría entre los siguientes pares de elementos:
  - NaF
  - CO<sub>2</sub>
  - H<sub>2</sub>O
  - O<sub>2</sub>
  - FeBr<sub>3</sub>
  - AgCl
- Enuncia las diferencias entre un compuesto iónico y uno covalente.
- Explica cuál es la regla que tienden a seguir los átomos para formar enlaces. ¿Por qué los iones presentes en un enlace iónico poseen más estabilidad química que sus respectivos átomos primitivos? ¿Qué elementos son estables con dos electrones? ¿por qué?
- ¿Qué tienen en común los iones F<sup>-1</sup>, N<sup>-3</sup> y O<sup>-2</sup> con el elemento Ne?
- ¿Qué son los electrones de valencia? ¿Cuántos posee un átomo de carbono? ¿Y uno de nitrógeno?
- Realiza las estructuras de Lewis de los siguientes compuestos:
  - H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>
  - Cl<sub>2</sub>O<sub>5</sub>
  - HNO<sub>2</sub>
  - H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>
  - CS<sub>2</sub>
  - CH<sub>4</sub>
  - NH<sub>3</sub>
  - CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH
- ¿Qué es un orbital atómico y cuántos electrones puede contener? ¿cuántos tipos de orbitales existen en los primeros cuatro niveles de energía?
- Dibuja en un mismo sistema de coordenadas ortogonales:
  - un orbital 1s y otro 2s.
  - un orbital p del 2º nivel y otro orbital p perpendicular pero del 3º nivel.
- ¿Qué es un orbital molecular? Explica la diferencia entre un OM  $\sigma$  y un OM  $\pi$ .
- ¿Cuántos orbitales moleculares se generan al combinarse dos orbitales atómicos? ¿En qué se diferencian los orbitales generados?



## UNIDAD II: GEOMETRÍA Y REPRESENTACIÓN DE LAS MOLÉCULAS ORGÁNICAS

En esta unidad, estudiaremos la **geometría de las moléculas**, es decir, cómo se unen los átomos que las forman y qué posiciones relativas adoptan al hacerlo. Además, presentaremos diversas formas de representar gráficamente a las moléculas, llamadas **fórmulas estructurales**, que permiten dar cuenta de su estructura y geometría.

El estudio de la geometría molecular es de enorme importancia en la química orgánica dado que permite comprender cómo interactúan entre sí y se asocian las moléculas de un compuesto y la forma de reaccionar químicamente con otras.

A partir de ello, veremos que es posible predecir ciertas propiedades físicas de las sustancias orgánicas tales como la densidad, las temperaturas de cambio de fase o la solubilidad y, asimismo, se pueden estudiar los posibles caminos que toman los reactantes para formar el o los productos de una reacción, es decir, los mecanismos por el que se dan las reacciones químicas.

### 2.1. Hibridación de orbitales atómicos

Según lo estudiado hasta aquí sobre la teoría de enlace, la **estructura y geometría** de las moléculas deberían estar determinadas por los orbitales atómicos (forma, tamaño y orientación del orbital) de los átomos que forman cada enlace y del tipo de solapamiento de éstos orbitales (frontal o lateral).

Sin embargo, si pretendiéramos aplicar la teoría de enlace tal como la hemos presentado para explicar estos aspectos de los compuestos que estudiaremos, nos encontraríamos con ciertas limitaciones y hallaríamos discrepancias entre lo predicho por la teoría y los resultados experimentales. Es por ello que se hace necesario incorporar un nuevo concepto a la teoría: **los orbitales híbridos**.

Un orbital atómico híbrido es una combinación de orbitales atómicos de valencia (del último nivel energético) pertenecientes al mismo átomo. Los orbitales atómicos que se encuentran muy cercanos en contenido energético se pueden combinar dando lugar a orbitales atómicos híbridos que, como veremos a continuación, permitirán al átomo formar el máximo número posible de enlaces y orientar las nubes electrónicas de los orbitales moleculares que formen de manera que la mayor separación angular posible.

***El número de orbitales atómicos híbridos que se forman es siempre idéntico al número de orbitales atómicos puros que se han combinado.***

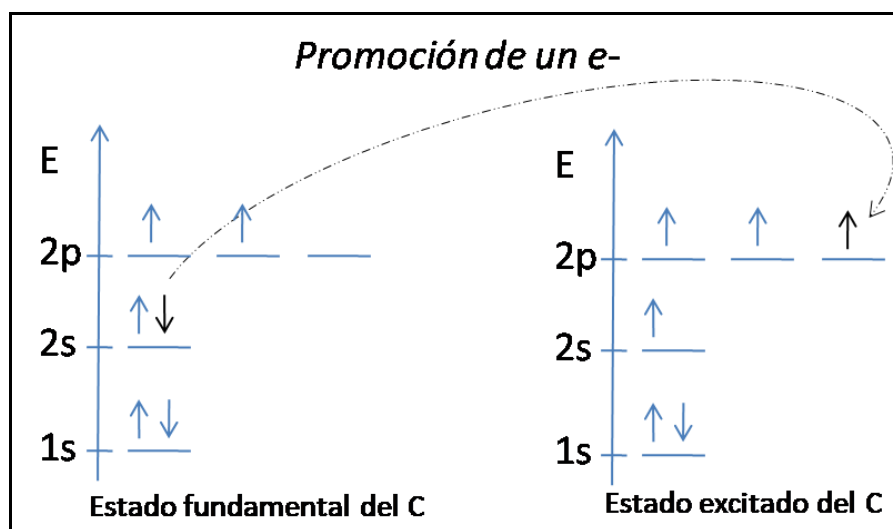
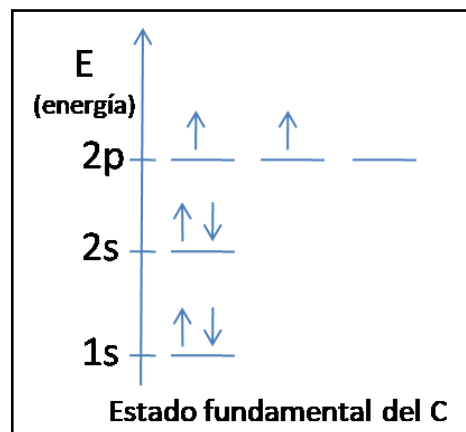
### 2.2. Orbitales híbridos $sp^3$

Para comprender mejor lo anterior, analizaremos el caso del átomo de carbono cuando forma compuestos en base a enlaces covalentes simples. Recordando su configuración electrónica ( $Z=6$ ), el átomo de carbono en su estado fundamental o basal tiene 2 orbitales atómicos llenos (1s y 2s), dos orbitales atómicos semillenos (2p) y un orbital atómico 2p vacío.

Al analizar esta configuración, vemos que el C cuenta sólo con dos electrones desapareados por lo que cabe esperar que al combinarse, por ejemplo con el hidrógeno, forme el compuesto carbeno  $\text{-CH}_2\text{-}$  uniéndose a dos átomos de H y dejando un orbital p vacío. Sin embargo, la formación de esta especie química ( $\text{CH}_2$ ) no estabiliza al átomo de carbono y no cumple con la regla del octeto, presentando una marcada tendencia a reaccionar para procurarle dos enlaces adicionales al carbono y formar la molécula de metano  $\text{-CH}_4\text{-}$ , mucho más estable químicamente.

Para explicar esta observación, debe tenerse en cuenta que la formación de enlaces es un proceso que libera energía y, por lo tanto, estabilizante. Es por ello que, al unirse para generar moléculas, **los átomos tienden a formar el máximo número de enlaces posible, incluso si esto condujera a una configuración electrónica diferente a la fundamental.**

En efecto, lo que sucede en este caso estudiado es que hay una **promoción (salto) de uno de los dos electrones apareados** desde el orbital 2s al orbital 2p vacío, quedando de esta forma cuatro orbitales atómicos semillenos (enlazantes), como puede observarse en la siguiente figura.



Esta promoción de un electrón define un nuevo estado de configuración del C, que es un **estado excitado** dado que tiene mayor contenido energético que el estado fundamental y que tendría la capacidad de formar cuatro enlaces.

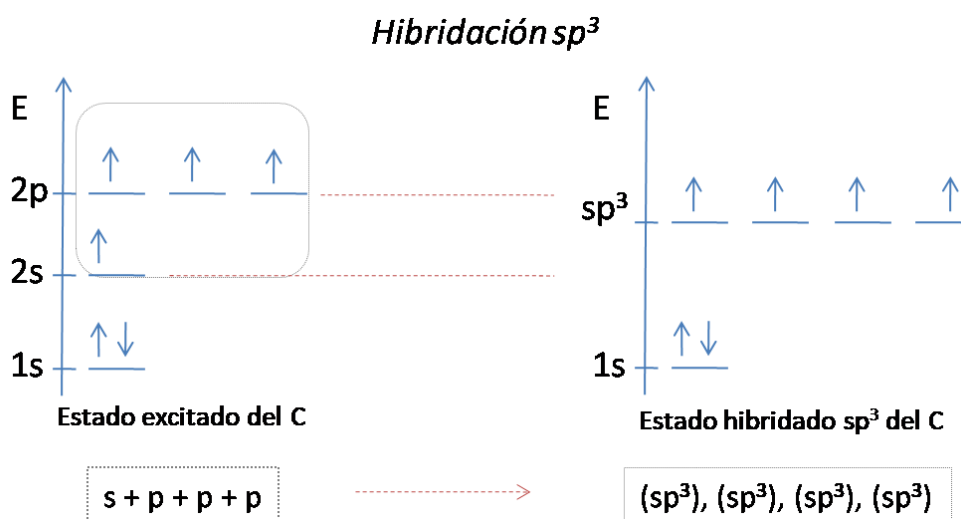
En cuanto a la orientación que presentarían los orbitales moleculares formados por este carbono excitado, teniendo en cuenta que los orbitales atómicos son s y p, sería esperable que todos los ángulos fueran aproximadamente de  $90^\circ$ . Esto se puede pensar de esta manera, dado que los orbitales s no tienen dirección por tener forma esférica y los 3 orbitales p siempre se encuentran en direcciones ortogonales.

**Sin embargo, la evidencia experimental demuestra que la molécula de  $\text{CH}_4$  tiene ángulos de enlace de aproximadamente  $109^\circ$ .**

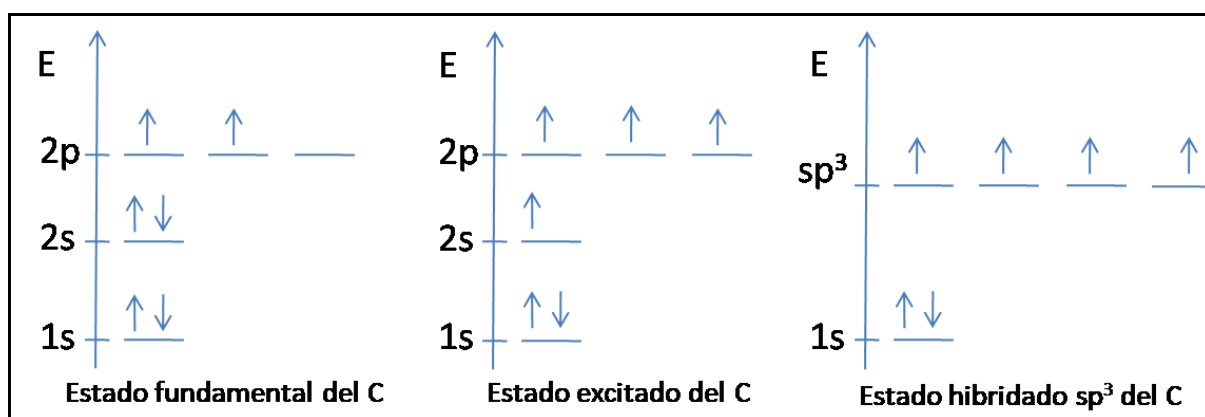


Esta observación puede explicarse mediante la Teoría de Repulsión de los Pares electrónicos de la capa de Valencia (TRePEV), que establece que los pares de electrones se repelen entre sí, por tanto los enlaces y los pares de electrones no enlazados alrededor de un átomo central tienden a estar separados por los ángulos más grandes posibles.

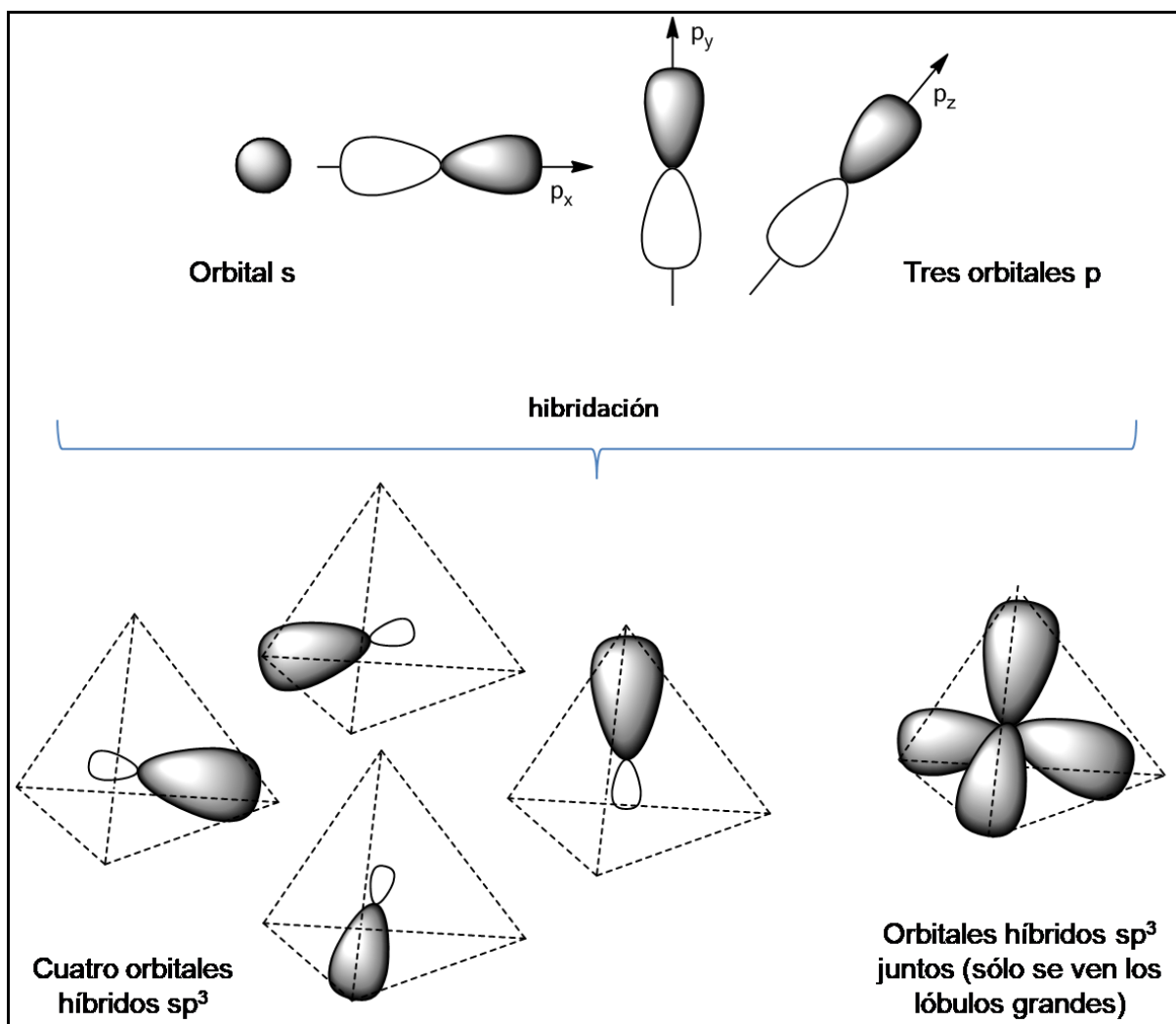
En concordancia con esta teoría y la evidencia experimental, **el modelo actual plantea que los cuatro orbitales atómicos de valencia (los 3p y el s), cada uno con un electrón desapareado, se mezclan (hibridizan) formando cuatro nuevos orbitales atómicos híbridos designados "sp<sup>3</sup>", y se genera una nueva configuración electrónica del estado hibridado del C sp<sup>3</sup>. Estos estados electrónicos se presentan en la figura siguiente.**



Cada uno de los 4 orbitales híbridos formados presenta 25 % de carácter s y 75 % de carácter p, son equivalentes entre sí y están separados por **ángulos de 109,5°**, salvo algunas excepciones, presentando una geometría de doble un lóbulo con uno de mayor volumen que apunta hacia uno de los vértices de un tetraedro regular. Ahora, el átomo de carbono sí está en condiciones de formar **cuatro enlaces covalentes σ equivalentes**, como los forma en la molécula de metano. A continuación se presentan las configuraciones electrónicas de los tres estados juntos, el fundamental, el estado excitado (promoción del electrón) y el estado híbrido.



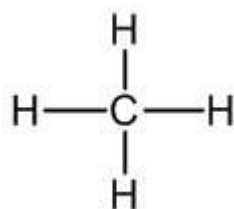
En la imagen siguiente se esquematiza la formación de los orbitales  $sp^3$ . Cada orbital híbrido presenta un lóbulo grande, que es el que participa en la formación del enlace, y un lóbulo pequeño. En el átomo estos cuatro orbitales se encuentran juntos. Se representan los lóbulos grandes orientados hacia el vértice de un tetraedro formando un ángulo de  $109,5^\circ$  entre ellos.



Teniendo en cuenta la geometría y orientación de los orbitales  $sp^3$ , resulta esperable que los elementos que presentan esta hibridación formen moléculas con **geometría tetraédrica**, como veremos a continuación.

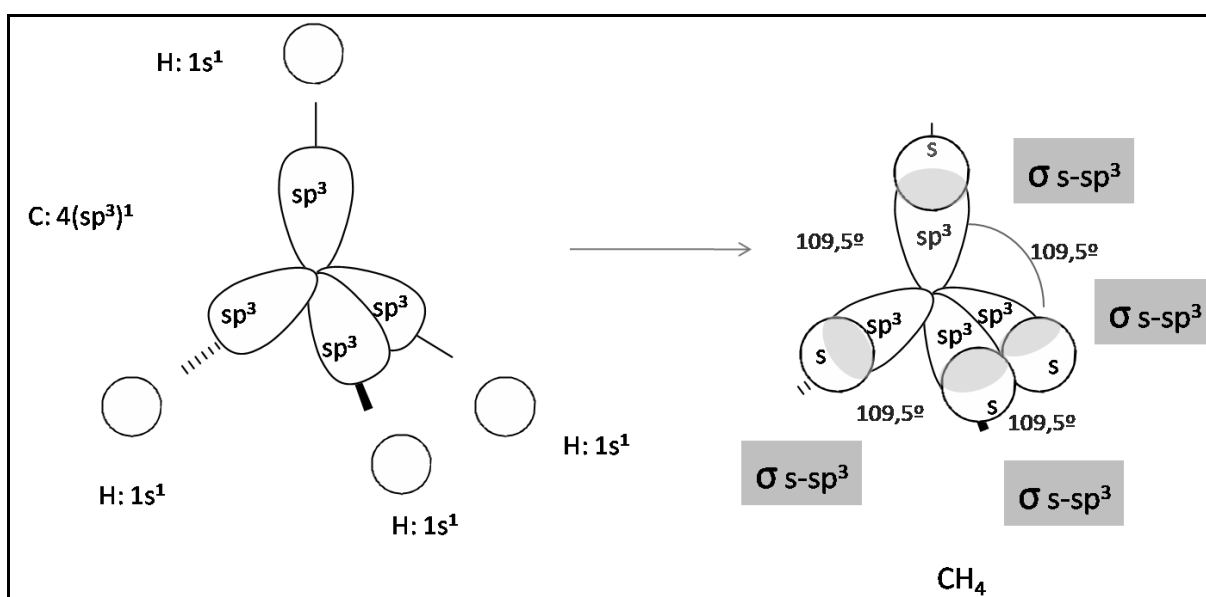
### 2.2.1. La molécula de metano

El **metano**, de fórmula molecular  $CH_4$ , es la sustancia orgánica más simple y su estructura consiste en un átomo de carbono unido mediante enlaces covalentes simples a cuatro átomos de hidrógeno.



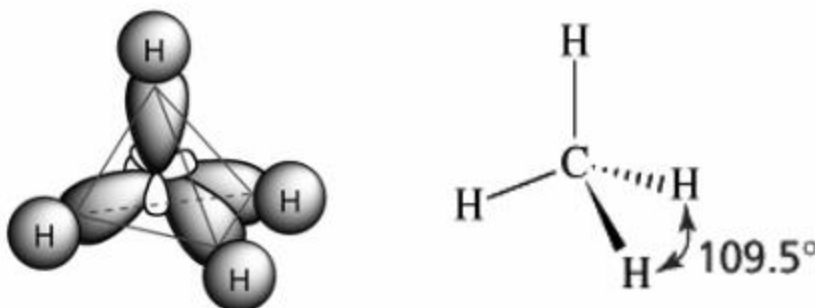
Fórmula de Lewis del metano

Para la formación de la molécula de metano, cada **orbital atómico híbrido  $sp^3$**  del carbono se **solapa** frontalmente con el **orbital atómico s** de cada uno de los cuatro hidrógenos, formando sendos enlaces  $\sigma$ .



Formación del metano: aproximación de los orbitales atómicos, solapamiento de los mismos y formación de los enlaces respetando los ángulos de máxima separación.

A continuación, se muestran dos representaciones de la molécula de metano:



Molécula de metano: geometría molecular (izq.) y fórmula de cuñas (der.).

- A la izquierda, la geometría molecular, en la que se grafican los OM (solapamiento de OA) y los OA con su forma y orientación espacial, como las que ya se venían utilizando.
- A la derecha, una estructura tridimensional simplificada, llamada **fórmula de cuñas**, en la que los orbitales son representados mediante líneas y cuñas. Se utilizan líneas para representar los enlaces que coinciden con el plano del papel, los que se proyectan saliendo del plano hacia el observador se representan por medio de una cuña entera, y para los que se dirigen hacia atrás del papel, es decir que se alejan del observador, se utiliza una cuña discontinua.

— hacia afuera  
..... hacia atrás  
— mismo plano

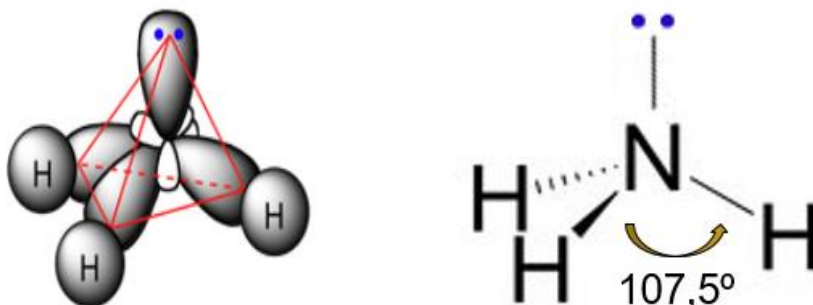
### 2.2.2. Distorsiones de la geometría tetraédrica

Es importante destacar que el concepto de hibridación se utiliza de forma similar para describir los enlaces en las moléculas con pares de electrones no enlazantes, como por ejemplo los átomos de nitrógeno y oxígeno.

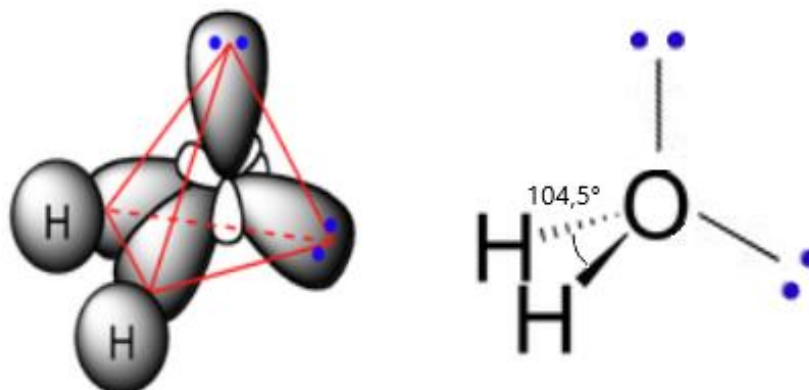
Cuando los átomos de estos elementos forman sólo enlaces covalentes simples, por ejemplo al unirse con átomos de hidrógeno para formar amoníaco ( $\text{NH}_3$ ) y agua ( $\text{H}_2\text{O}$ ), lo hacen con hibridación  $\text{sp}^3$ . En el caso de nitrógeno, se tendrán tres orbitales  $\text{sp}^3$  semillenos (enlazantes) y uno con dos electrones apareados (no enlazantes), mientras que el oxígeno presentará dos orbitales  $\text{sp}^3$  semillenos y otros dos completos

**En el nitrógeno, cuando presenta la hibridación  $\text{sp}^3$ , los ángulos de enlace son de  $107,5^\circ$  en vez de  $109,5^\circ$** , debido a que el orbital atómico con dos electrones de no enlace ejerce una repulsión mayor sobre los orbitales enlazantes, produciendo que los ángulos entre estos últimos se achiquen. Cabe mencionar que los electrones no enlazantes se encuentran con mayor libertad dado que no tienen otro núcleo ejerciendo otra fuerza de atracción sobre ellos y por ende ocupan un mayor volumen.

**En el oxígeno**, al tener dos orbitales atómicos con electrones no enlazantes, **el ángulo formado por los orbitales de enlace se reduce aún más, adquiriendo un valor de  $104,5^\circ$** .



Molécula de amoníaco: geometría molecular (izq.) y fórmula de cuñas (der.).

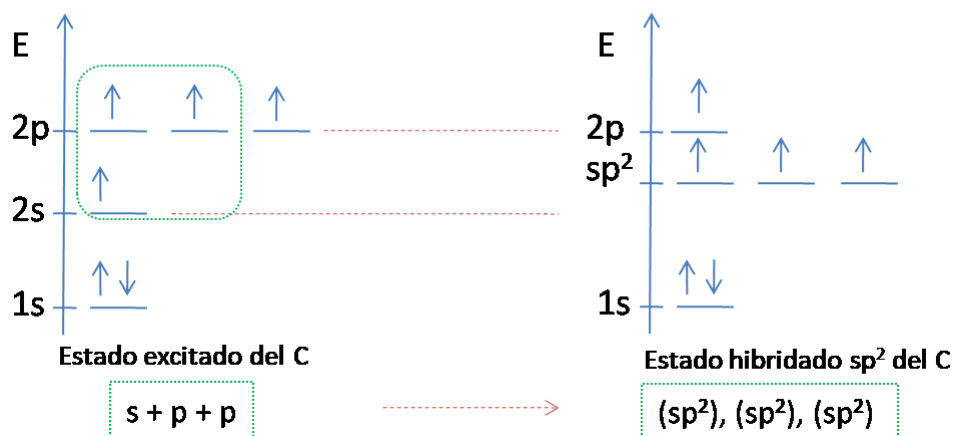


Molécula de agua: geometría molecular (izq.) y fórmula de cuñas (der.).

### 2.3. Orbitales híbridos $sp^2$

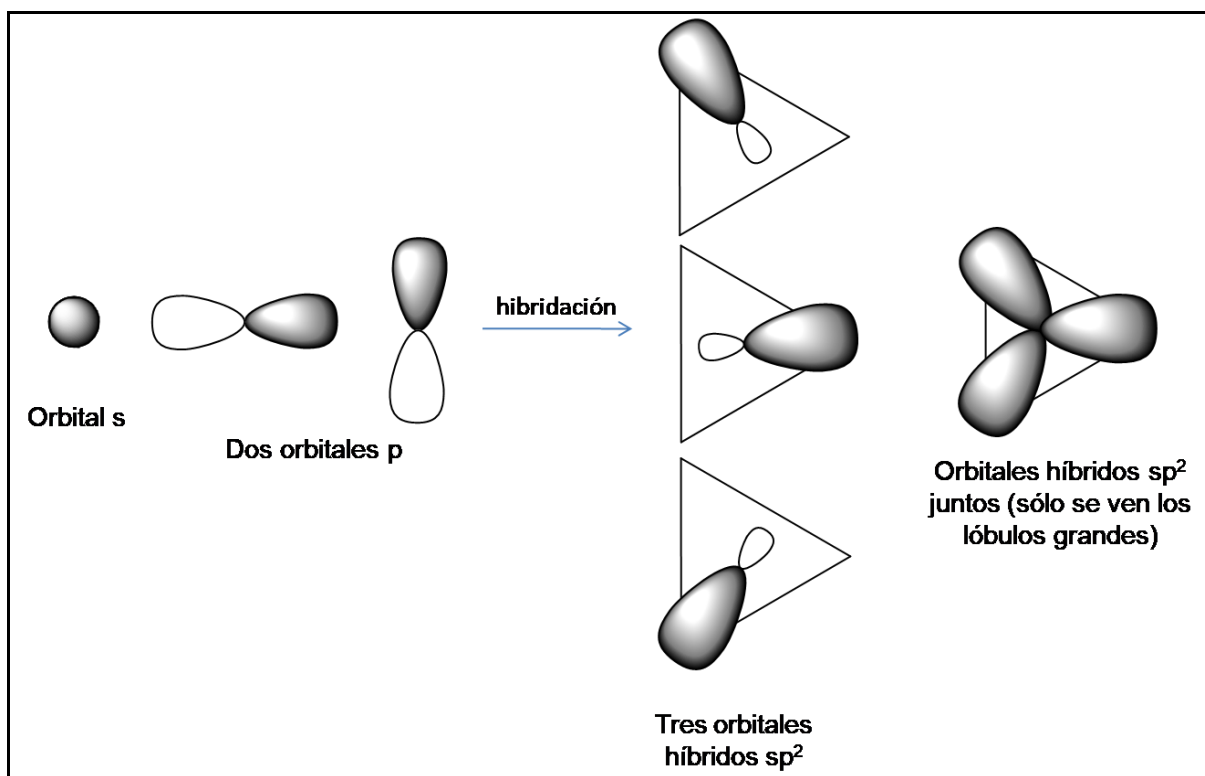
En ciertas condiciones, puede darse la combinación de un orbital s con dos orbitales p, generándose tres orbitales híbridos que se conocen como **orbitales  $sp^2$** , y se encuentran en un plano, formando **ángulos de  $120^\circ$**  entre sí. Cada uno de estos orbitales es equivalente a los demás, pero se orientan en una dirección distinta. Contienen un 33,33 % de carácter s y un 66,67 % de carácter p.

#### Hibridación $sp^2$

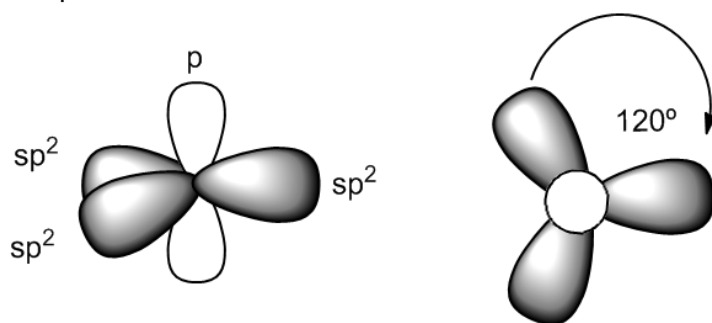


Debido a la orientación que adoptan los OAH  $sp^2$ , las moléculas formadas a partir de los mismos, tienen una **geometría trigonal plana** con los enlaces orientados hacia los vértices de un triángulo equilátero

A continuación, se esquematiza la formación de los orbitales  $sp^2$  donde puede verse que, nuevamente, cada orbital híbrido presenta un lóbulo grande, que es el que participa en la formación del enlace, y un lóbulo pequeño. En el átomo, estos orbitales se encuentran juntos, formando un ángulo de  $120^\circ$  entre ellos y solo se representan los lóbulos grandes.



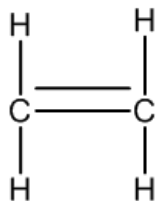
En este tipo de hibridación queda **un orbital p puro** libre cuyos lóbulos se encuentran perpendiculares al plano que contiene los orbitales híbridos y es capaz de formar un orbital molecular  $\pi$  mediante el solapamiento lateral con otro orbital p. En el próximo apartado, veremos que esta situación corresponde a la formación de un enlace covalente doble.



Vistas frontal y superior de un átomo con hibridación  $sp^2$

### 2.3.1. La molécula de eteno o etileno

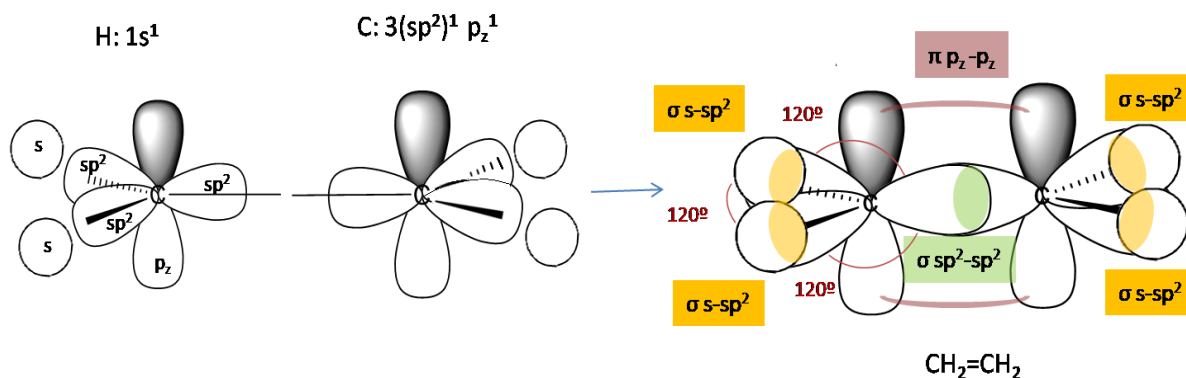
El concepto de hibridación es útil para explicar la formación de enlaces múltiples en moléculas orgánicas. Para comprobar esto, analizaremos el ejemplo del **eteno o etileno** es el alqueno más sencillo, de fórmula molecular  $C_2H_4$ :



Fórmula de Lewis del eteno o etileno

En esta molécula, cada átomo de carbono forma dos enlaces simples y uno doble, lo que indica que cada C presenta una hibridación  $sp^2$ , es decir, cuenta con tres orbitales atómicos híbridos que se encuentran en un mismo plano formando un ángulo de  $120^\circ$  entre ellos y son capaces de formar tres enlaces covalentes sigma equivalentes y, además, con un orbital atómico p perpendicular a dicho plano que es capaz de formar un enlace  $\pi$  mediante un solapamiento lateral.

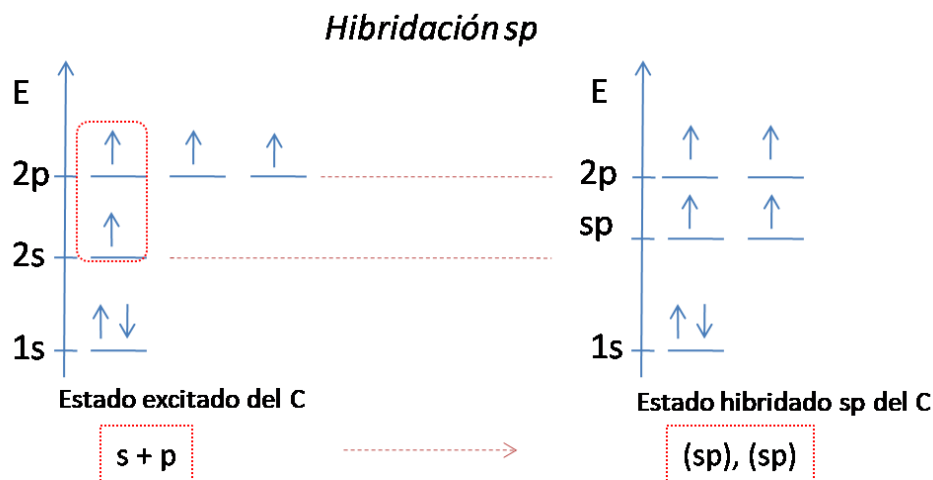
Esta configuración hibridizada de los carbonos que forman el etileno les permite unirse mediante un solapamiento frontal de dos OAH  $sp^2$  generando un enlace  $\sigma$  y mediante el solapamiento lateral de los 2 orbitales p puros semillenos generando un enlace  $\pi$ . Además, cada C se une mediante los otros dos OAH  $sp^2$  a un OA s de un H. La formación de esta molécula se representa en la siguiente figura.



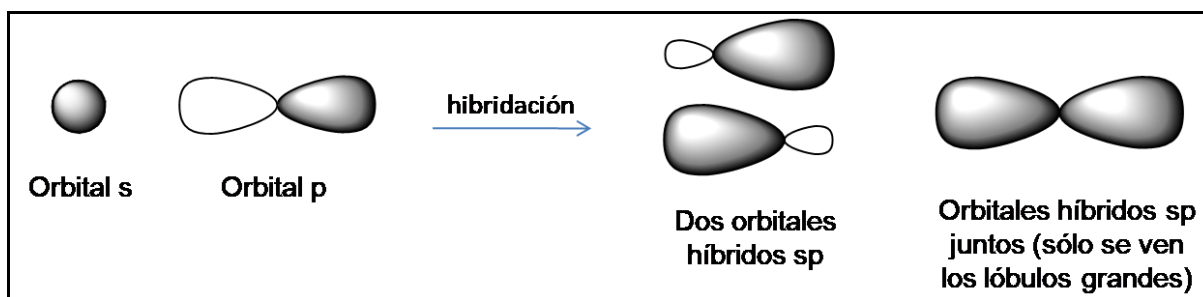
Formación de enlaces entre los átomos que constituyen la molécula de etileno

## 2.4. Orbitales híbridos sp

Cuando se combina un orbital s con un orbital p se originan **dos orbitales híbridos sp**, cuya energía es intermedia a la de los orbitales originales s y p. Cada orbital híbrido sp presenta un 50% de carácter s y un 50% de carácter p.

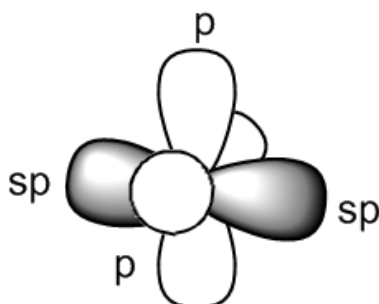


Estos orbitales se orientan formando un **ángulo de 180°** y así, separan a los electrones de enlace lo máximo posible. Las moléculas formadas mediante estos orbitales tienen una **geometría lineal**. En la imagen siguiente se esquematiza la formación de los orbitales sp.



Como puede observarse, estos orbitales presentan un lóbulo grande que es el que participa en la formación del enlace y un lóbulo pequeño. En el átomo, estos orbitales se encuentran juntos, formando un ángulo de 180° y solamente se representan los lóbulos grandes que son los enlazantes.

En este tipo de hibridación o hibridización quedan **dos orbitales p puros**, perpendiculares a los orbitales híbridos, que están disponibles para formar **orbitales moleculares  $\pi$**  mediante solapamiento lateral con otros dos orbitales p puros. Como veremos en el próximo apartado, esta configuración le permitirá formar al átomo un enlace triple o bien, dos enlaces dobles.

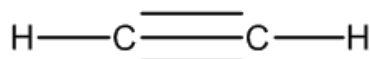


Vista frontal de un átomo con hibridación sp



### 2.4.1. La molécula de etino o acetileno

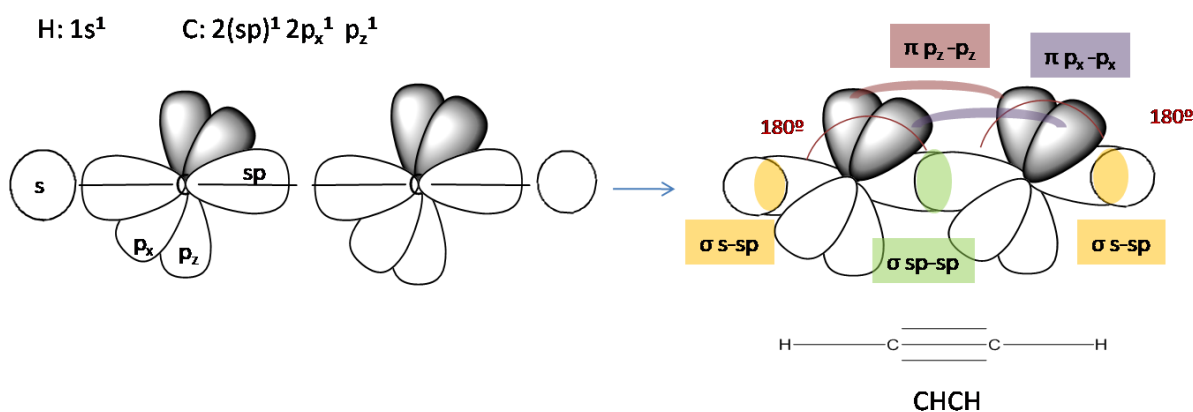
Otra manera de enlazarse dos átomos de carbono es formando un triple enlace entre ellos, de esta forma se genera el alquino más sencillo llamado etino o acetileno, el cual es un gas a temperatura ambiente de fórmula molecular  $C_2H_2$ . En este compuesto, cada átomo de carbono se encuentra unido a otro átomo de carbono y a un átomo de hidrógeno.



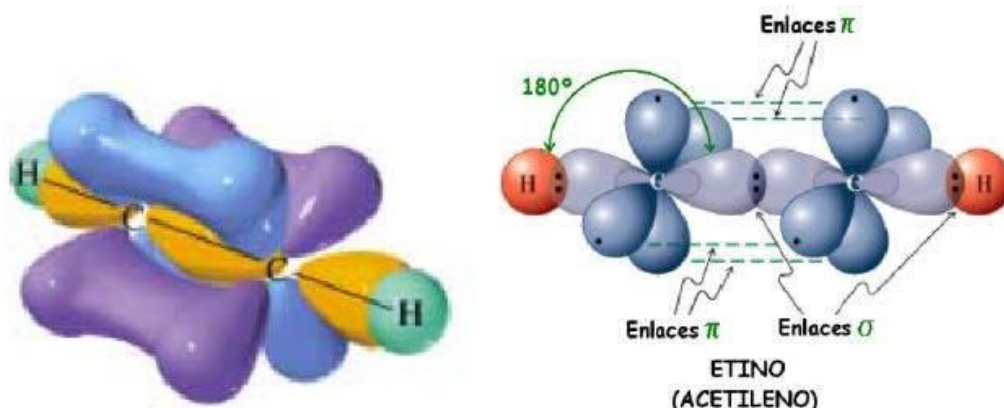
Fórmula de Lewis del etino o acetileno

Para generar esta estructura, cada átomo de carbono combina un orbital 2s con un orbital 2p formando **dos orbitales híbridos sp**, los cuales se ubican formando un ángulo de  $180^\circ$  entre ellos. Por lo tanto, mediante estos orbitales híbridos el C forma dos enlaces covalentes  $\sigma$  mientras que, con los dos orbitales 2p puros semllenos que le quedan perpendiculares entre sí y perpendiculares a los dos orbitales híbridos sp, forma dos enlaces covalentes  $\pi$ .

Entonces en la formación de la molécula del acetileno cada carbono se une a un hidrógeno mediante el solapamiento de un orbital híbrido sp con un s del H formando un enlace  $\sigma$ . La triple unión entre los átomos de carbono se da mediante un solapamiento frontal de dos OAH sp formando un enlace  $\sigma$ , mediante un solapamiento lateral de dos orbitales p formando un enlace  $\pi$  y finalmente por otro solapamiento lateral del otro par de OA puros p perpendiculares que forman un nuevo enlace  $\pi$ .



Formación de enlaces entre los átomos que constituyen la molécula de acetileno



Representación de los enlaces de la molécula de acetileno<sup>2</sup>

### 2.5. Resumen

A modo de resumen de las hibridaciones vistas hasta el momento, se presenta la siguiente tabla:

Orbitales atómicos simples	Orbitales atómicos híbridos	Hibridación	Geometría	Ángulos de enlace aproximados
2 s + p	2	sp, sp	Lineal	$180^\circ$
3 s + p + p	3	$sp^2$ , $sp^2$ , $sp^2$	Trigonal	$120^\circ$
4 s + p + p + p	4	$sp^3$ , $sp^3$ , $sp^3$ , $sp^3$	tetraédrica	$109,5^\circ$

### 2.6. Fórmulas estructurales

Una **molécula** es la mínima unidad de una sustancia que sigue conservando sus características y propiedades particulares. Es un grupo eléctricamente neutro y relativamente estable de al menos dos átomos.

La **fórmula molecular (FM)** es la fórmula que indica, mediante símbolos atómicos con subíndices asociados, qué elementos químicos y cuántos átomos de cada uno están unidos formando una molécula de una determinada sustancia. Los números que se presentan como subíndices en la fórmula molecular indican el grado de atomicidad, la cantidad de cada átomo en la molécula.

Ejemplos:

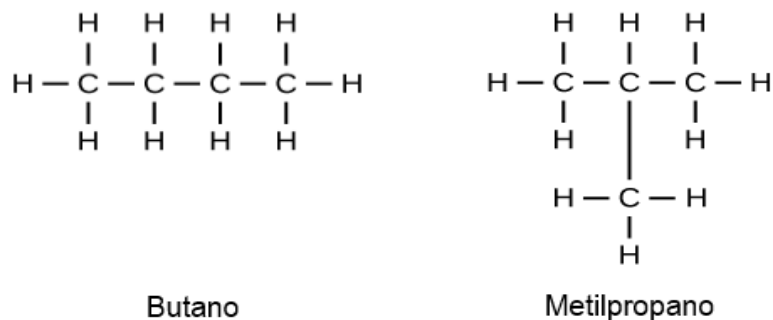
- $H_2O$  → fórmula molecular del agua;
- $C_3H_8$  → fórmula molecular del propano;
- $H_2SO_4$  → fórmula molecular del ácido sulfúrico.

La fórmula molecular, si bien útil en tanto representación abreviada de la composición atómica de la molécula, no proporciona ninguna información acerca de la conectividad entre los átomos ni sobre la distribución espacial de los mismos. Por lo tanto, mediante la fórmula molecular sería



muy dificultoso seguir los cambios internos que se dan en las moléculas cuando participan de reacciones químicas y tampoco se podrían distinguir los compuestos denominados **isómeros**, que presentan la misma fórmula química, pero poseen distinta estructura molecular, es decir, los átomos se unen en distinto orden.

Un ejemplo de esta **isomería estructural** se da con los compuestos orgánicos butano y metilpropano, ambos de FM  $C_4H_{10}$ :



**Fórmulas de Lewis de los isómeros estructurales butano (izq.) y metilpropano (der.)**

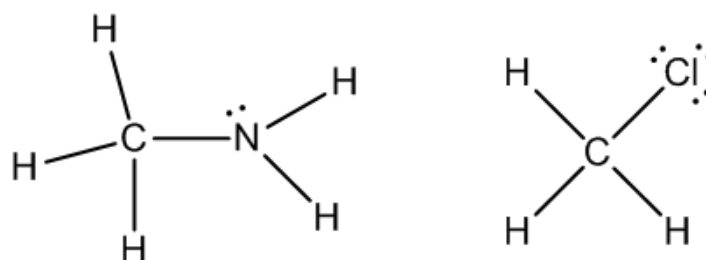
Por este motivo es que, para poder profundizar nuestro estudio de la química orgánica, debemos incorporar nuevas representaciones que nos brinden más información sobre la estructura de las moléculas: **las fórmulas estructurales**.

Estas fórmulas nos permitirán representar gráficamente cómo se ordenan los átomos en la molécula mostrando explícita o implícitamente los enlaces químicos dentro de la misma y, cuando resulte necesario, también mostrar cómo se distribuyen espacialmente, es decir la geometría de la molécula. A continuación, se presentan las fórmulas que utilizaremos, explicando brevemente en qué consiste cada una de estas formas de representación.

### 2.6.1. Fórmula desarrollada o de Lewis

En este tipo de fórmula se representan todos los átomos por sus símbolos, los enlaces covalentes que los unen por trazos y los electrones de no enlace se representan con puntos alrededor del símbolo del átomo que corresponda.

Ejemplos: metilamina y clorometano.



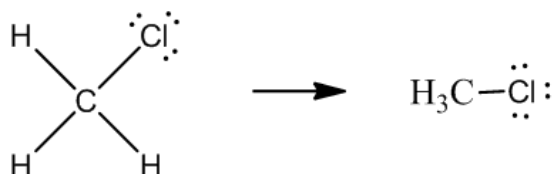
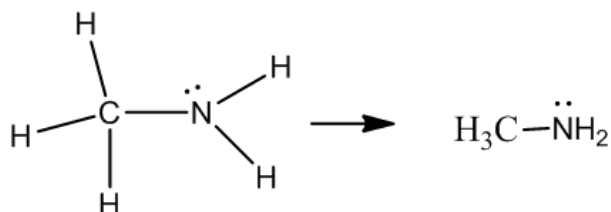
**Fórmulas desarrolladas de la metilamina (izq.) y el clorometano (der.)**

<sup>2</sup> Imagen tomada de la página web <http://www.cienciatotal.es/clases/quimicas2bach/hibridacion.htm>

### 2.6.2. Fórmula semidesarrollada o semicondensada

Se representa la molécula como texto, escribiendo solamente el/los enlaces que se desee identificar. Es decir, se omiten los trazos que representan los enlaces, excepto aquellos que, por alguna razón, se desee explicitar.

Siguiendo con los ejemplos anteriores y mostrando sólo los enlaces del C con otro átomo que no sea C o H:



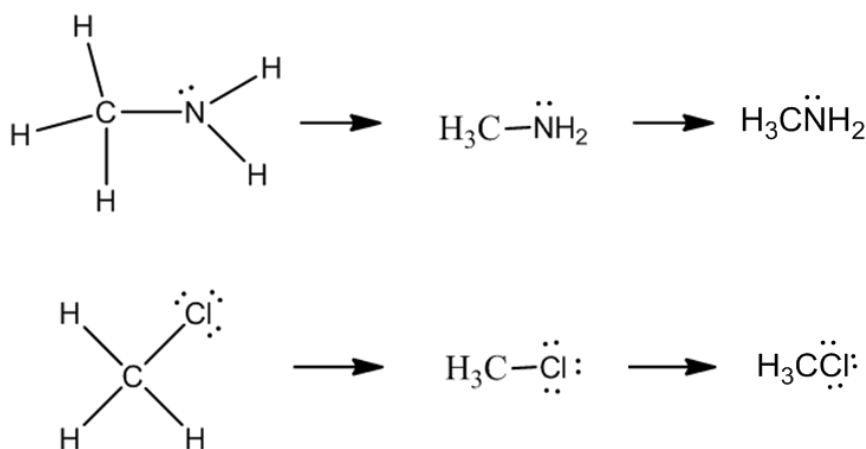
Fórmulas desarrolladas (izq.) y semidesarrolladas (der.)

Es importante aclarar que una representación es una fórmula semidesarrollada o semicondensada siempre que quede explícito al menos un enlace, puede haber más de uno, pero no todos sino tendríamos una fórmula desarrollada.

### 2.6.3. Fórmula condensada

Toda la molécula se escribe como texto, es decir, se omiten todos los enlaces y se indica (si es el caso) el número de grupos idénticos entre paréntesis unidos a un átomo con un subíndice.

Siguiendo con los ejemplos anteriores, metilamina y clorometano, en la figura siguiente se muestran las tres fórmulas vistas hasta el momento:

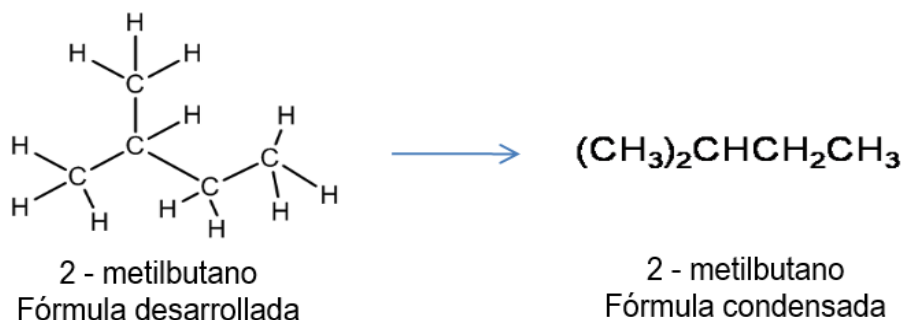


Fórmulas desarrolladas (izq.), fórmulas semidesarrolladas (entre ambas flechas) y fórmulas condensadas (der.)



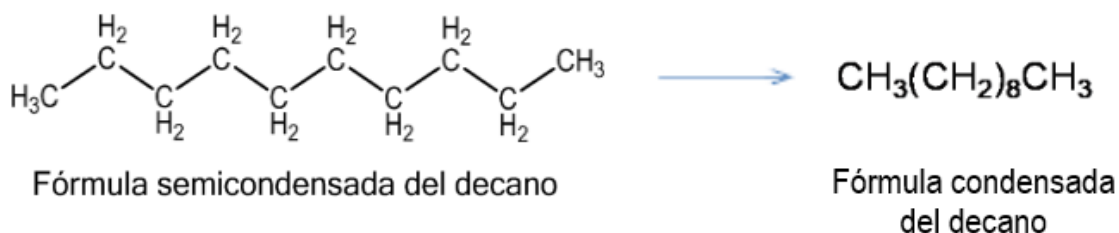
Veamos otros ejemplos:

### **2-metilbutano (C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>)**



Cuando la cadena carbonada es larga, se pueden abreviar los grupos **metileno (-CH<sub>2</sub>-)** centrales entre paréntesis, indicando la cantidad de grupos con un subíndice a continuación.

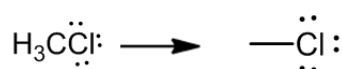
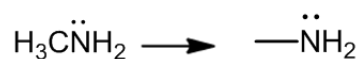
### **decano (C<sub>10</sub>H<sub>22</sub>)**



#### **2.6.4. Fórmula de esqueleto**

La fórmula de esqueleto, también llamada fórmula taquigráfica, representa la molécula mediante líneas unidas en zig-zag, donde cada línea representa un enlace y cada quiebre o final de cadena es un carbono (con todos los hidrógenos unidos que necesite para completar su octeto). Se omite escribir los símbolos de los átomos de C y el de los H unidos a ellos, **sí deben escribirse los H que no están unidos al C**. Los enlaces múltiples se escriben como líneas paralelas.

Siguiendo con los ejemplos anteriores, de la metilamina y clorometano, se presentan sus fórmulas de esqueleto:



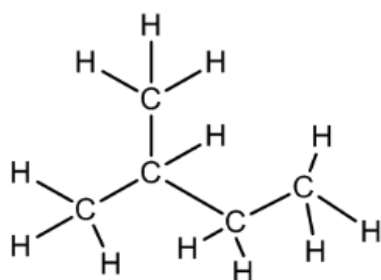
Fórmulas condensadas (izq.) y de esqueleto (der.)

# Química Orgánica I

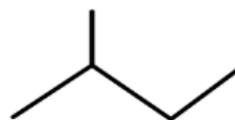
## Química orgánica

Veamos otros ejemplos:

### 2-metilbutano ( $C_5H_{12}$ )

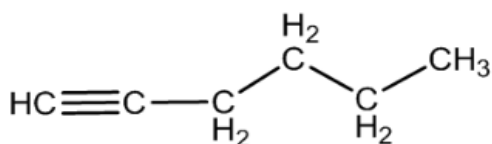


2 - metilbutano  
Fórmula desarrollada

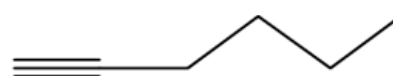


2 - metilbutano  
Fórmula esqueleto

### 1-hexino ( $C_6H_{10}$ )

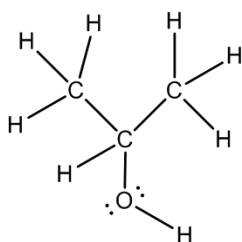


1 - Hexino  
Fórmula semidesarrollada

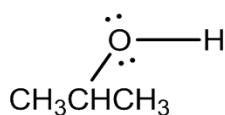


1 - Hexino  
Fórmula esqueleto

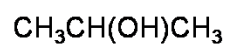
### 2-propanol ( $C_3H_8O$ )



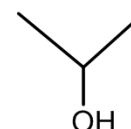
Fórmula desarrollada



Fórmula semidesarrollada  
(mostrando solamente los enlaces carbono-oxígeno y oxígeno-hidrógeno).



Fórmula condensada

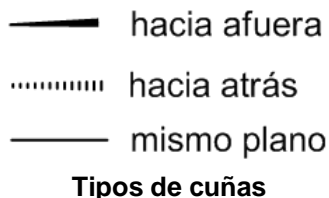


Fórmula de esqueleto



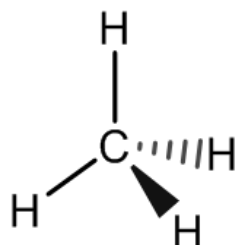
### 2.6.5. Fórmula tridimensional o de cuñas

Es una representación con perspectiva que contiene información sobre la distribución de los átomos en el espacio. Se utilizan **líneas rectas** para los enlaces que están en el **plano**, **cuñas llenas** para enlaces que están saliendo del plano y **cuñas partidas** para enlaces que están por detrás del plano.

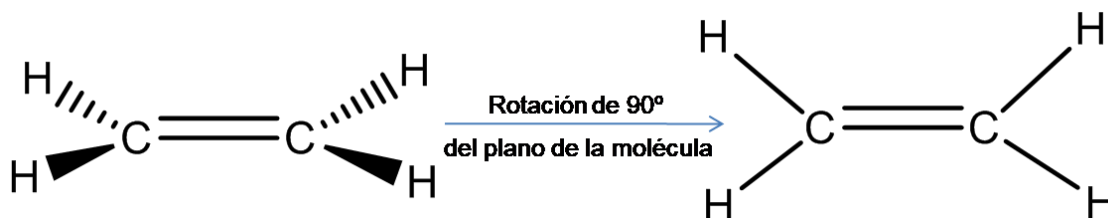


Ejemplos:

*metano (CH<sub>4</sub>)*



*Etileno (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>)*

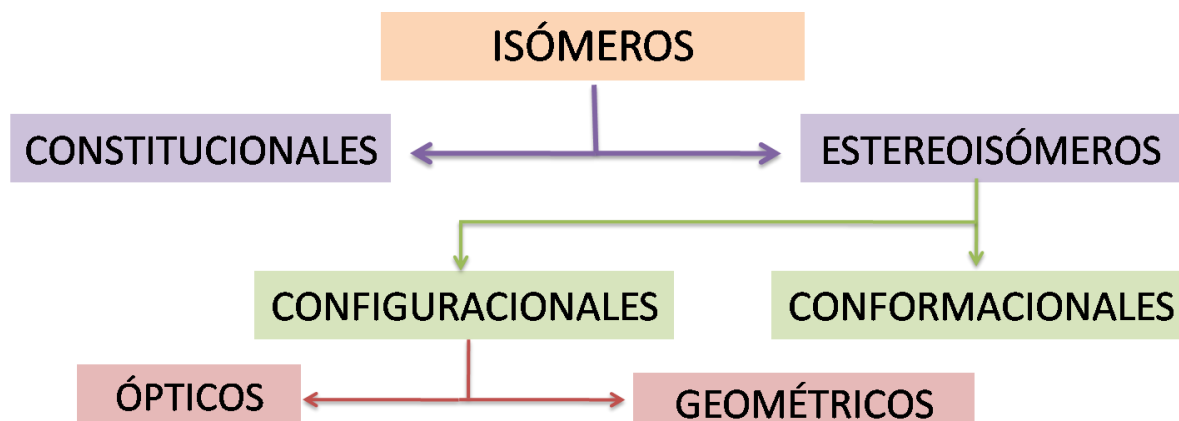


### 2.7. Conceptos básicos de Estereoquímica

Con la palabra estereoquímica nos referimos a la química en el marco del espacio tridimensional.

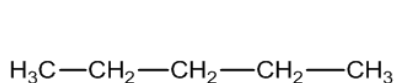
En la sección 2.6 definimos la **fórmula molecular** de una sustancia que indica, mediante símbolos atómicos con subíndices asociados, el número de átomos diferentes que están presentes; sin embargo, las diferentes **fórmulas estructurales** son las que indican la manera en la que estos átomos están conectados y ubicados en el espacio. En algunas ocasiones es posible acomodar los mismos átomos en más de una forma. Los compuestos con igual fórmula molecular, pero diferentes ordenamientos se llaman **isómeros**. Estos compuestos pueden diferir tanto en sus propiedades físicas como químicas, por ejemplo, suelen tener diferentes puntos de ebullición o reaccionar de forma diferente frente a un mismo compuesto.

Existen muchas clases de isomería, en el esquema se resumen los diferentes tipos de isómeros:

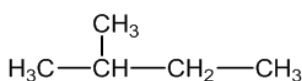


### 2.7.1. Isómeros constitucionales o estructurales

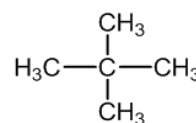
Son isómeros que difieren en su secuencia de enlace; es decir, sus átomos están conectados de manera distinta. Anteriormente vimos a modo de ejemplo que se generan dos compuestos con la fórmula molecular  $C_4H_{10}$ , el butano y el metilpropano. Claramente, conforme aumenta el número de átomos de carbono aumenta rápidamente el número de isómeros. Hay tres isómeros constitucionales del pentano ( $C_5H_{12}$ ), cuyos nombres comunes son n-pentano, isopentano y neopentano.



n-pentano



isopentano



neopentano

Isómeros de FM:  $C_5H_{12}$

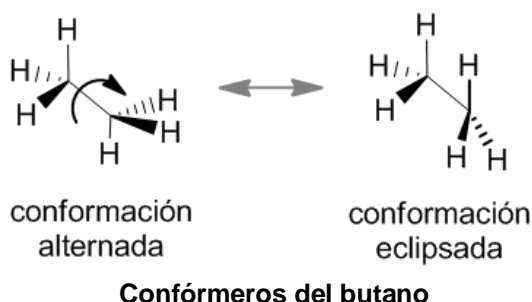
### 2.7.2. Estereoisómeros

Son isómeros que tienen la misma conectividad pero que difieren en el arreglo (orientación) de sus átomos en el espacio. Hay dos clases de estereoisómeros:

- ★ *Isómeros conformacionales o confómeros*: son aquellos que pueden interconvertirse rápidamente por rotación de enlace y no pueden separarse.

Las **conformaciones** de una molécula son las diferentes disposiciones de sus átomos en el espacio que se generan por rotación de enlaces sencillos.

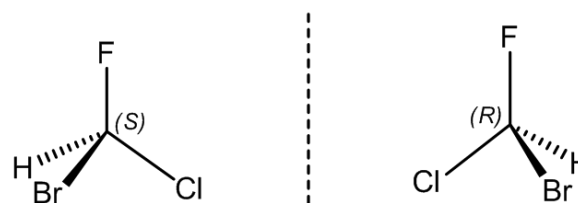
Veamos un ejemplo, en la molécula de etano ( $C_2H_6$ ) podemos observar dos conformaciones opuestas; la **conformación alternada** en la cual los enlaces carbono-hidrógeno están lo más separado posible de los enlaces del otro átomo de carbono; y la **conformación eclipsada**, donde los enlaces carbono-hidrógeno están alineados con los enlaces carbono-hidrógeno del otro átomo de carbono. A temperatura ambiente se interconvierten los confómeros por rotación del enlace simple entre ambos átomos de carbono.



★ *Isómeros configuracionales*, son aquellos que no pueden interconvertirse por rotación de enlaces y, por tanto, pueden separarse.

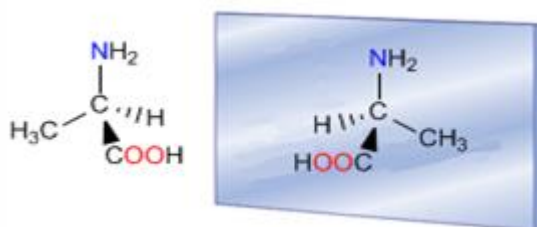
Los isómeros configuracionales pueden ser enantiómeros (isómeros ópticos) o diastereómeros. Todos los estereoisómeros que no son enantiómeros son diastereómeros. A continuación, explicaremos brevemente qué son cada uno de ellos y nos detendremos específicamente en un tipo de estereoquímica, la isomería geométrica.

Los **isómeros ópticos o enantiómeros**, son imágenes especulares (imagen reflejada en un espejo) uno del otro no superponibles. Es posible dibujar la imagen especular de cualquier molécula, pero la isomería aparece cuando estas imágenes no son superponibles. Esto sucede cuando la molécula cuenta con un centro de quiralidad. Este concepto de quiralidad es muy importante en el estudio de la química biológica.



Enantiómeros  
Imagen especular uno de otro

Un átomo de carbono que se encuentra unido a cuatro sustituyentes diferentes presenta en ese carbono un estereocentro. A este tipo de carbono se le suele llamar carbono asimétrico. En las siguientes imágenes se representa moléculas con esta isomería donde se dibujan ambos enantiómeros y se representa el espejo como línea de puntos.

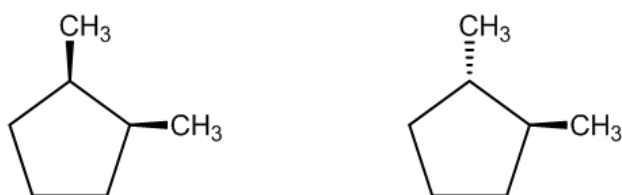


Ejemplo de enantiómeros de un aminoácido (Alanina)<sup>3</sup>

<sup>3</sup> Imagen tomada de la página web <https://www.quimicaorganica.net/enantiomeros.html>

Los **isómeros geométricos** son diastereómeros que presentan la misma configuración en un centro y opuesta en el otro. Tienen propiedades físicas diferentes y pueden separarse por métodos físicos. Este tipo de isomería se da cuando existe un doble enlace entre dos carbonos (**C=C**) con configuraciones diferentes o un **ciclo con dos sustituyentes** y se habla de **isomería cis-trans**.

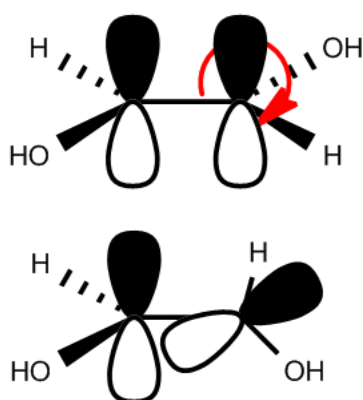
Si tenemos una molécula cíclica la rigidez de los anillos y la falta de libre rotación de los enlaces C-C da lugar a la estereoisomería. Los dos sustituyentes de un anillo pueden estar en lados opuestos del plano del anillo (*trans*); o bien, pueden estar del mismo lado del plano del anillo (*cis*).



cis-1,2-dimetilciclopentano

trans-1,2-dimetilciclopentano

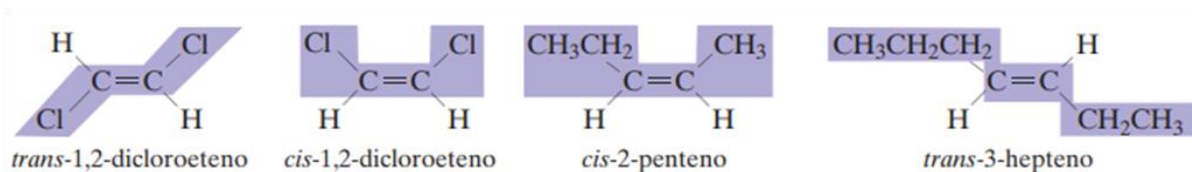
### Isómeros geométricos del compuesto 1,2-dimetilciclopentano



Como vimos anteriormente, la unión entre dos átomos de carbono en un doble enlace implica un enlace  $\sigma$  entre dos OAH  $sp^2$  y un enlace  $\pi$  que se da por la interacción de dos OA  $p$  puros. La rigidez del doble enlace es quien origina la isomería. El solapamiento lateral de los orbitales  $p$  limita la rotación del doble enlace dado que al rotar uno de los carbonos se pierde el solapamiento  $p-p$ , rompiéndose el enlace. En la figura adjunta a la izquierda se ilustra lo desarrollado.

Es importante destacar que para tener estereoisomería no basta solamente con un doble enlace, sino también que estén presentes dos sustituyentes diferentes en cada uno de los dos carbonos del doble enlace.

Cuando un alqueno presenta estereoisomería en la nomenclatura debe especificarse. En los alquenos simples como vamos a ver las designaciones **cis** y **trans** pueden usarse sin ambigüedad. En el **isómero cis** los grupos o sustituyentes están del mismo lado del doble enlace, mientras que en los **isómeros trans** los grupos en lados opuestos.



### Moléculas con isomería cis y trans<sup>4</sup>

<sup>4</sup> Imagen tomada del libro SEYHAN EGE: Química Orgánica. Estructura y Reactividad. Tomo 1. Cap. 6, pág 242

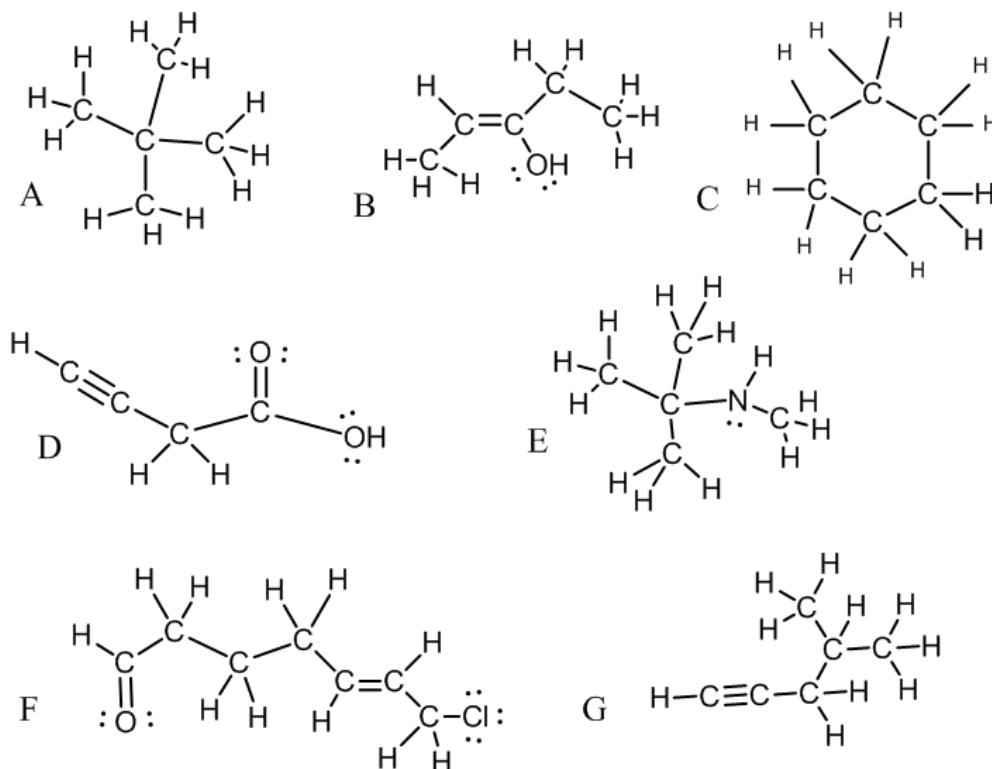


## 2.8. Guía de estudio

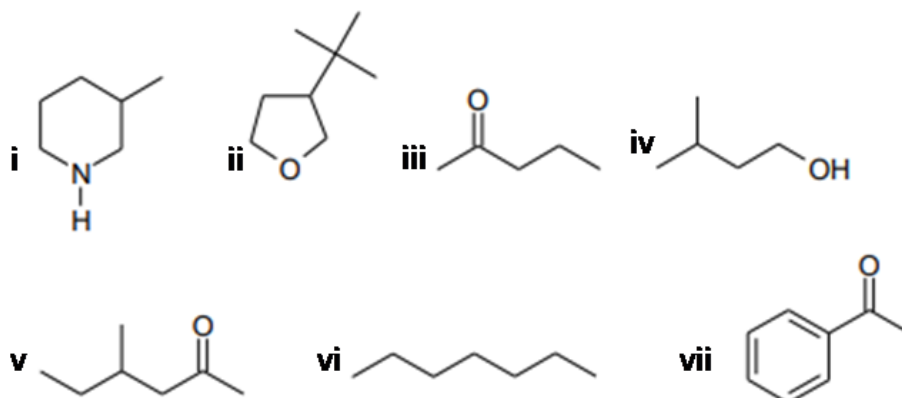
- Realiza la configuración electrónica en función de la energía del estado basal y del estado hibridado  $sp^3$  de los siguientes átomos: N y O.
- Realiza la configuración electrónica en función de la energía del átomo de carbono en estado fundamental. En ese estado,
  - ¿cuántos orbitales atómicos llenos, semillenos y vacíos posee?
  - Conforme a la TRePEV y a la configuración realizada, ¿cuántos enlaces covalentes simples podría formar?
  - Entonces, ¿cómo se explica la formación de 4 enlaces simples del C en diversas moléculas? ¿cómo se explica la tetravalencia del C?
- Indica si las siguientes afirmaciones son verdaderas o falsas. Justifica tu respuesta.
  - La hibridación del átomo de carbono es un proceso que siempre origina orbitales híbridos equienergéticos.
  - En la hibridación del  $sp^3$  del nitrógeno siempre se origina un orbital atómico puro donde se aloja el par de electrones no compartido.
  - Es característico de la hibridación  $sp^2$  que los orbitales híbridos tengan un 50% de carácter s y 50% de carácter p.
  - El número de orbitales híbridos es igual al número de orbitales puros que se combinaron para su formación.
  - Es característico de la hibridación  $sp^3$  del C la orientación trigonal plana de los orbitales híbridos.
  - En un átomo con hibridación  $sp^2$  el orbital p que no participó en la hibridación puede formar un enlace  $\pi$  con otro orbital p.
  - Los orbitales híbridos  $sp$  se disponen formando un ángulo de  $90^\circ$ .
  - Los orbitales híbridos presentan simetría esférica.
  - Un orbital molecular  $\pi$  se genera cuando se solapan de forma lateral dos orbitales híbridos.
  - Un enlace  $\sigma$  se genera cuando se solapan frontalmente dos orbitales atómicos.
- Realiza el diagrama de orbitales de las siguientes moléculas. Nombre todos tipos de enlaces presentes, las hibridaciones de los átomos, los OA y los OM. Indica, además, los ángulos de enlace. ¿Qué ángulos sufren una distorsión y por qué?
  - $(CH_3)_3CH$
  - $CH_3COCH_3$
  - $CH_3CH(OH)CH_3$
  - $CH_3CH_2CHO$
  - $CH_3OCH_3$
  - $CH_3CH_2COOH$
  - $CH_3CHCHBr$
  - $CH_3CCCH_3$
  - $CH_3CH_2CONH_2$
  - $HCN$
  - $(CH_3)_2CHCH_2CH(NH_2)CH_3$
  - $N(CH_3)_2$

Da una fórmula desarrollada de cada molécula respetando los ángulos de enlace.

5. Dibuja las fórmulas semicondensadas (hay más de una opción), condensadas, de esqueleto y molecular de las siguientes fórmulas desarrolladas:

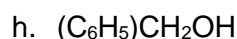
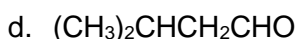
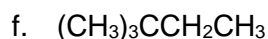
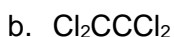
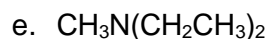
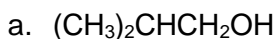


6. Dibuja la fórmula estructural desarrollada y una fórmula estructural condensada para:
- Tres compuestos de fórmula  $C_3H_8O$
  - Cinco compuestos de fórmula  $C_3H_6O$
7. Transforma las siguientes fórmulas de esqueleto en fórmulas desarrolladas:

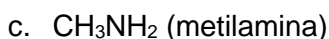
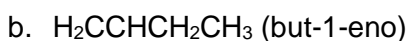
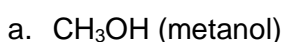




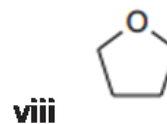
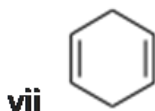
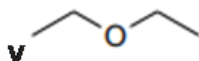
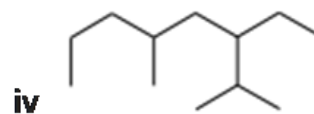
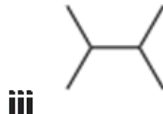
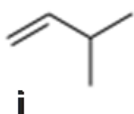
8. Expande las siguientes fórmulas condensadas de manera que se muestren todos los enlaces



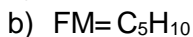
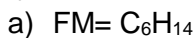
9. Dibuja la fórmula tridimensional o de cuñas de los siguientes compuestos:



10. Para las siguientes estructuras indica el número correcto de hidrógenos unidos a cada carbono:



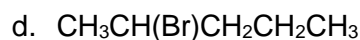
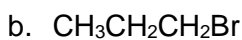
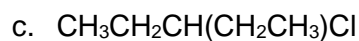
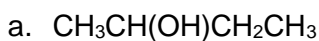
11. Dibuja todos los isómeros constitucionales posibles con:



12. Dibuja las posibles conformaciones del butano ( $\text{C}_4\text{H}_{10}$ ) mediante fórmulas tridimensionales realizando las rotaciones correspondientes entre el carbono 2 y 3.

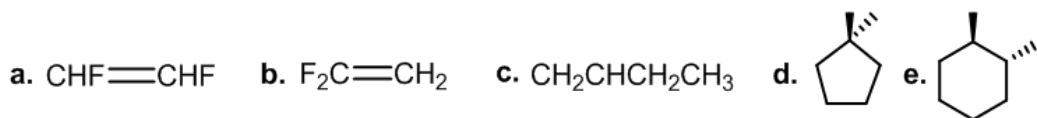
13. Representa en el espacio dos isómeros ópticos del  $\text{H}_3\text{CCHBrF}$ .

14. Determina si existe algún estereocentro, C asimétrico, en cada uno de los siguientes compuestos. Si los hay, dibuja ambos enantiómeros.

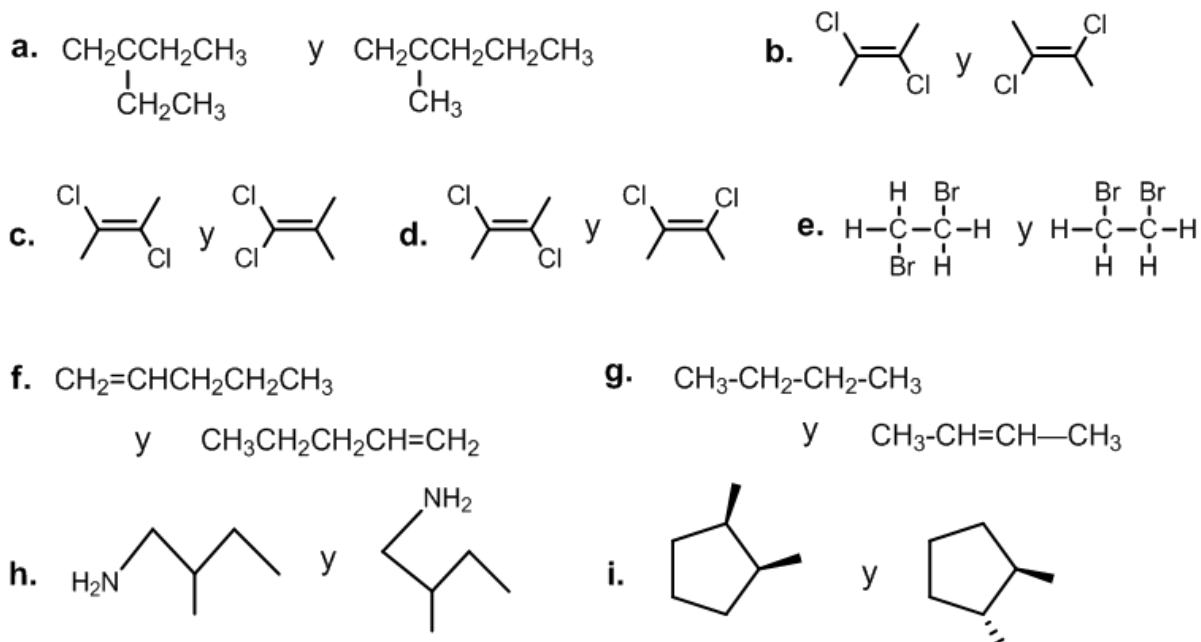


15. Representa en el espacio los isómeros geométricos del  $\text{CH}_3\text{CHCHBr}$

16. ¿Cuál de los siguientes compuestos presenta isomería *cis-trans*? Para los que presenten dibuja ambos isómeros.



17. Para los siguientes pares de estructuras indica la relación que presentan. Relaciones posibles: *compuestos diferentes*, *isómeros constitucionales*, *isómeros geométricos*, *confórmers*, *mismo compuesto*.





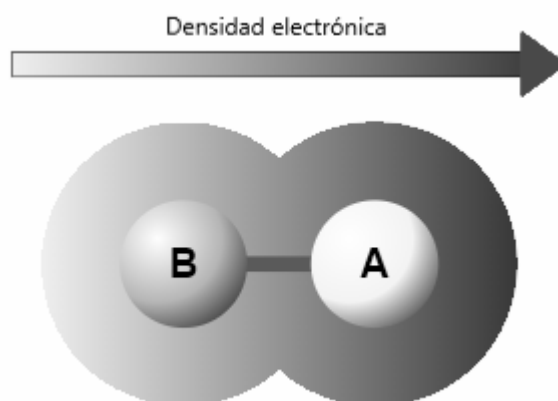
## Unidad III: Estructura molecular, fuerzas intermoleculares y propiedades físicas de las sustancias orgánicas

En esta unidad, continuaremos el estudio de las sustancias orgánicas concentrándonos en comprender las relaciones que existen entre la estructura de sus moléculas y ciertas propiedades físicas macroscópicas de las sustancias como las temperaturas de cambio de fase y la solubilidad, entre otras.

Veremos que, para una sustancia dada, las propiedades físicas anteriormente mencionadas dependen en gran medida de la masa de sus moléculas y de las fuerzas que existen entre éstas y las moléculas que las rodean. Estas **fuerzas intermoleculares** estarán determinadas, a su vez, por la estructura de dichas moléculas, es decir el tipo de átomos que la componen, cómo se unen entre sí y cómo se orientan en el espacio. A continuación, estableceremos estas relaciones.

### 3.1. Polaridad de enlace y momento dipolar

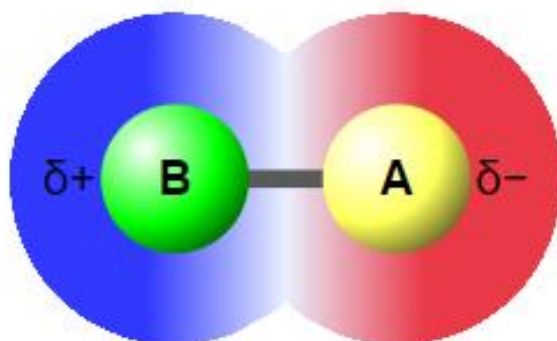
Aparte de las propiedades ya descritas, algunos enlaces covalentes tienen otra: **la polaridad**. Como vimos en la unidad uno, dos átomos unidos por un enlace covalente comparten electrones y sus núcleos son mantenidos en la misma nube electrónica u orbital molecular. Los electrones de los enlaces covalentes sólo están compartidos por igual cuando los átomos enlazados son idénticos entre sí. En aquellos casos en los que los átomos enlazados difieren en su tendencia a atraer electrones, es decir, que difieren en electronegatividad, estos núcleos no comparten los electrones por igual generando que la nube electrónica se distorsione y sea más densa en torno al átomo más electronegativo (en la figura siguiente, el átomo A).



Distribución de la densidad en un enlace polar.

Este desplazamiento de la densidad de carga da lugar a que un extremo del enlace sea relativamente negativo y el otro, relativamente positivo, formándose un polo negativo y otro positivo. Se dice que éste es un **enlace polar o que tiene polaridad**.

Podemos indicar la polaridad empleando los símbolos  $\delta^+$  y  $\delta^-$ , que indican cargas parciales positiva y negativa (se dice «delta más» y «delta menos»).



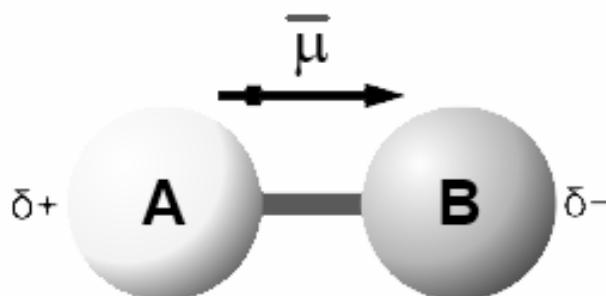
De los elementos que normalmente trabajaremos en química orgánica, la electronegatividad más elevada la presenta el flúor, luego el oxígeno, seguido del nitrógeno y el cloro, a continuación el bromo y, finalmente, el carbono. El hidrógeno no difiere mucho en electronegatividad del carbono.

Electronegatividad  $F > O > Cl, N > Br > C > H$

Cuando se tiene un enlace polar, **la intensidad del dipolo se cuantifica con el momento dipolar ( $\mu$ )**, una **magnitud vectorial** que resulta del producto de la carga parcial desplazada  $\delta$  por la longitud de enlace  $d_{AB}$ , es decir, la distancia que separa a los núcleos atómicos. La unidad de momento dipolar es el **debye (D)**:  $1 D = 3,34 \times 10^{-30} \text{ Coulomb} \times \text{metro}$ .

$$\mu = \delta \cdot d_{AB}$$

En tanto magnitud vectorial, el momento dipolar presenta no sólo un valor numérico -el módulo- sino también dirección y sentido. La dirección de  $\mu$  coincide con la del eje internuclear del orbital de enlace y el sentido se asigna hacia el átomo más electronegativo.



A continuación, veremos que la polaridad de los enlaces puede conducir a polaridades de moléculas y esto afectará considerablemente a las fuerzas intermoleculares determinantes, en gran medida, de numerosas propiedades físicas de las sustancias orgánicas.

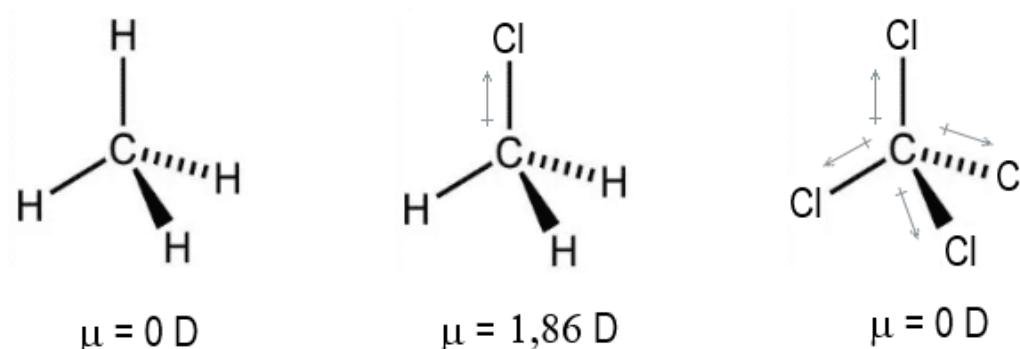


### 3.2. Momento dipolar resultante: Moléculas polares y apolares

Cuando en una molécula existe más de un enlace polar, el efecto neto de estos dipolos sobre la distribución de carga global de la molécula puede estimarse a partir de la suma vectorial de los momentos dipolares que existen en su interior. En caso de que el momento dipolar resultante sea no nulo existirá una distribución irregular de cargas en la molécula y se dice que ésta es **polar** y si, por el contrario, la sumatoria de los  $\mu$  de enlace resultara nula, la molécula será **apolar**.

A continuación, analizaremos algunos ejemplos para ilustrar este modelo.

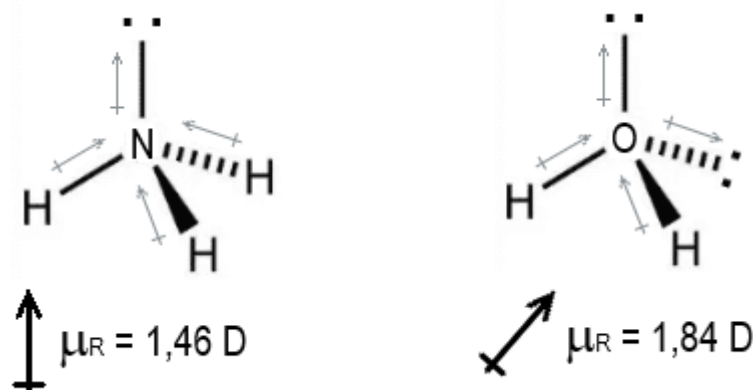
*Ejemplo: metano ( $CH_4$ ), cloruro de metilo ( $CH_3Cl$ ) y tetracloruro de carbono ( $CCl_4$ )*



Podemos observar que, mientras el metano presenta un momento dipolar molecular nulo dado que los cuatro enlaces C-H son poco polares, el momento dipolar de la molécula de cloruro de metilo es 1,86 D por la presencia del enlace C-Cl, significativamente polar por la diferencia de electronegatividad que existe entre estos dos elementos.

Por su parte, la molécula de tetracloruro de carbono resulta ser apolar a pesar de contar con cuatro enlaces C-Cl. Esto se debe a que la geometría tetraédrica de la molécula (hibridación  $sp^3$  del carbono), altamente simétrica, hace que la sumatoria vectorial de los cuatro momentos de enlace que apuntan hacia los átomos de cloro resulte nula.

*Ejemplo: amoníaco y agua*



*En los casos del amoníaco y el agua, se tienen dos moléculas de geometría tetraédrica con los átomos centrales, nitrógeno y oxígeno, presentando hibridación  $sp^3$  y con uno y dos pares electrónicos no enlazantes respectivamente.*

*Debe notarse que, en ambos casos, se representaron **momentos dipolares asociados a los pares de electrones no enlazantes** con sentido hacia éstos que fueron tenidos en cuenta a la hora de realizar la sumatoria vectorial de los  $\mu$  de enlace. Esto debe ser así ya que, si bien el concepto de momento dipolar de enlace se definió exclusivamente para enlaces entre átomos, estos dos momentos asociados a los electrones no enlazantes permiten incorporar al cálculo de la polaridad de la molécula el efecto de estas nubes electrónicas en la distribución de carga global en la misma.*

### 3.3. Fuerzas intermoleculares

Hasta el momento, hemos visto que en la naturaleza los átomos se unen mediante enlaces covalentes para formar estructuras eléctricamente neutras denominadas moléculas que permiten a los átomos alcanzar configuraciones electrónicas más estables que las fundamentales.

Como los compuestos moleculares pueden encontrarse naturalmente en los tres estados de agregación de la materia (gas, líquido y sólido), es lógico pensar que existen fuerzas que atraen entre sí a las moléculas y que son las responsables de su condensación a los estados líquido o sólido. A su vez, cómo para las sustancias covalentes estos cambios de estado se dan normalmente a temperaturas bajas o presiones altas, se deduce que las **fuerzas intermoleculares** son relativamente más débiles que las involucradas en los enlaces químicos.

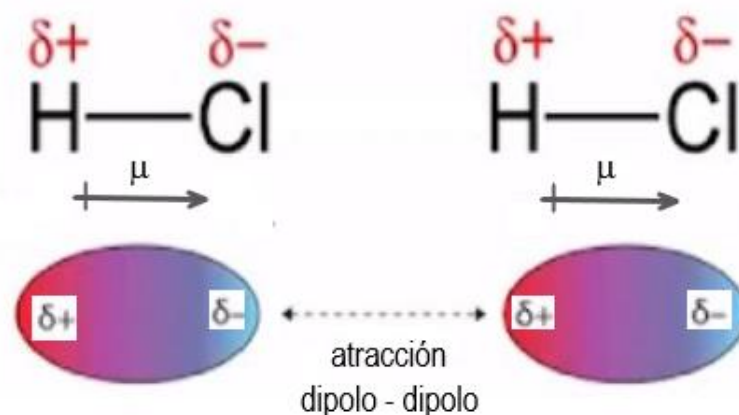
Se sabe que las fuerzas intermoleculares, denominadas genéricamente **fuerzas de Van der Waals**, son de naturaleza electrostática y se originan por la atracción entre dipolos presentes en las moléculas. Dependiendo de si los dipolos son de carácter permanente o transitorio, las interacciones de Van der Waals se clasifican en tres tipos:

- ★ **Dipolo-dipolo:** atracción entre dipolos permanentes y por lo tanto, preponderante **en moléculas polares**.
- ★ **Puentes de Hidrógeno:** atracción entre dipolos permanentes que se producen **en moléculas que presentan un átomo de hidrógeno enlazado a un átomo fuertemente electronegativo** como el nitrógeno, el oxígeno o el flúor.
- ★ **Fuerzas de London:** atracción debida a dipolos transitorios que se generan entre las **moléculas apolares**.

A continuación, se presentarán las características de cada una de estas tres clases de fuerzas intermoleculares.

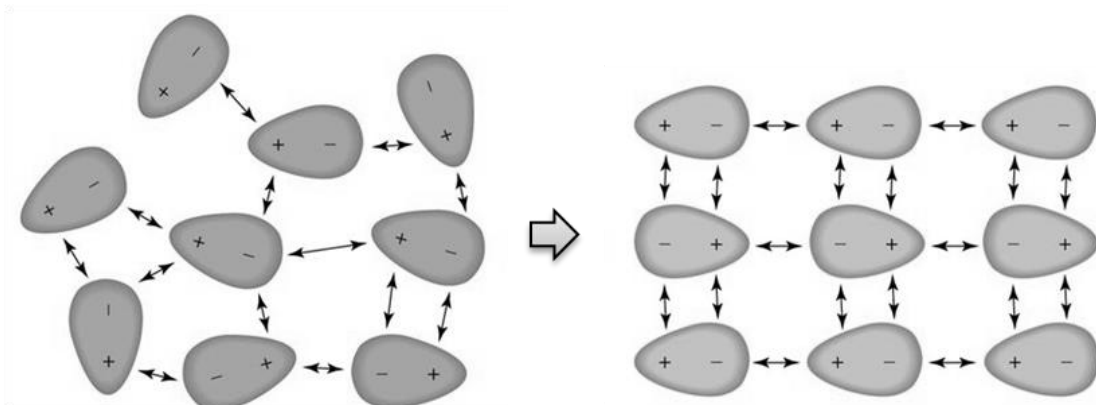
#### 3.3.1. Fuerzas dipolo-dipolo

Se establecen entre los dipolos permanentes que existen en las **moléculas polares** y son relativamente intensas. Las moléculas se orientan de modo tal que los polos de signo contrario de moléculas contiguas quedan enfrentados. Los dipolos se atraen entre sí y el ordenamiento se extiende a todo el material.



### Atracción dipolo-dipolo entre dos moléculas polares de cloruro de hidrógeno

Las moléculas giran y se reordenan hacia la situación de mayor estabilidad, en la cual las cargas se compensan, estando los polos opuestos cerca.



### Moléculas de una sustancia polar interactuando mediante fuerzas dipolo-dipolo

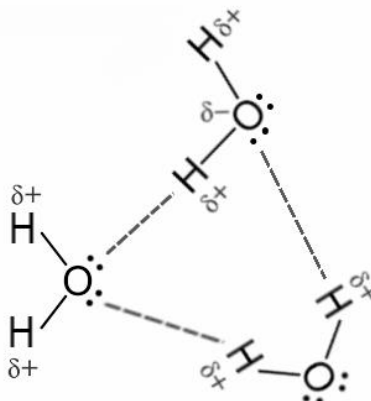
Estas fuerzas serán más intensas cuanto mayor sea la polaridad de las moléculas y también cuanto mayor sea el tamaño de los átomos que las constituyen, dado que los dipolos serán más intensos cuanto mayor sea el número de electrones involucrados.

### 3.3.2. Puentes de Hidrógeno

Un tipo de atracción dipolo-dipolo particularmente fuerte es la unión por **punto de hidrógeno**, en el cual un átomo de hidrógeno sirve como puente entre dos átomos electronegativos.

Cuando un átomo de hidrógeno está unido covalentemente a un átomo muy electronegativo, como **oxígeno, flúor o nitrógeno**, el enlace está muy polarizado. El átomo de hidrógeno en esta situación tiene gran afinidad por los electrones no enlazantes de otros átomos de oxígeno, flúor o nitrógeno de moléculas vecinas. La fuerte interacción resultante se denomina puente de hidrógeno y, si bien es mucho más débil que el enlace covalente, es bastante más fuerte que las atracciones dipolo-dipolo entre moléculas polares.

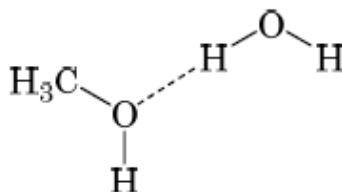
Al representar, mediante alguna fórmula estructural, moléculas que interactúan por puentes de hidrógeno, éstos se indican generalmente por una línea de puntos:



**Puentes de hidrógeno entre moléculas de agua**

Para que un enlace por puente de hidrógeno sea importante, ambos átomos electronegativos deben ser del grupo F, O, N. Sólo es suficientemente positivo un hidrógeno enlazado a uno de estos elementos y sólo estos tres son suficientemente negativos para que exista la atracción necesaria. Estos tres elementos deben su efectividad especial a la carga negativa concentrada sobre sus átomos pequeños.

Como se ilustra a continuación, **los puentes de hidrógeno pueden formarse entre moléculas iguales o diferentes.**



**Puente de hidrógeno entre moléculas de agua y metanol (CH<sub>3</sub>OH)**

En próximos apartados, comprenderemos que los puentes de hidrógeno son responsables de muchas de las anómalas propiedades físicas del agua -elevados puntos de fusión y ebullición o elevada tensión superficial- que presentan enorme importancia para el desarrollo de numerosos procesos físicos, químicos y biológicos.

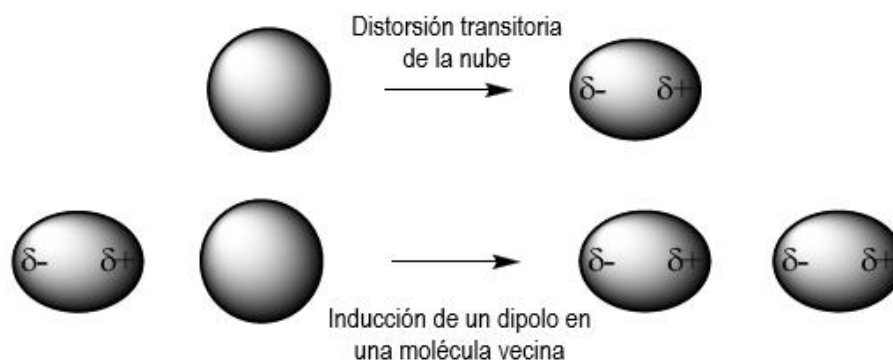
### 3.3.3. Fuerzas de London

Son de menor intensidad que las anteriores, pero muy importantes pues son las que cohesionan las moléculas de los compuestos apolares. El movimiento continuo de los electrones alrededor del núcleo<sup>5</sup> crea pequeñas distorsiones en la distribución de carga de las moléculas apolares

<sup>5</sup> En la siguiente página web puede verse el movimiento de la nube electrónica de una molécula polar.  
<http://jorgegarciaquimica.blogspot.com/2015/03/las-fuerzas-de-dispersion-de-london-un.html>

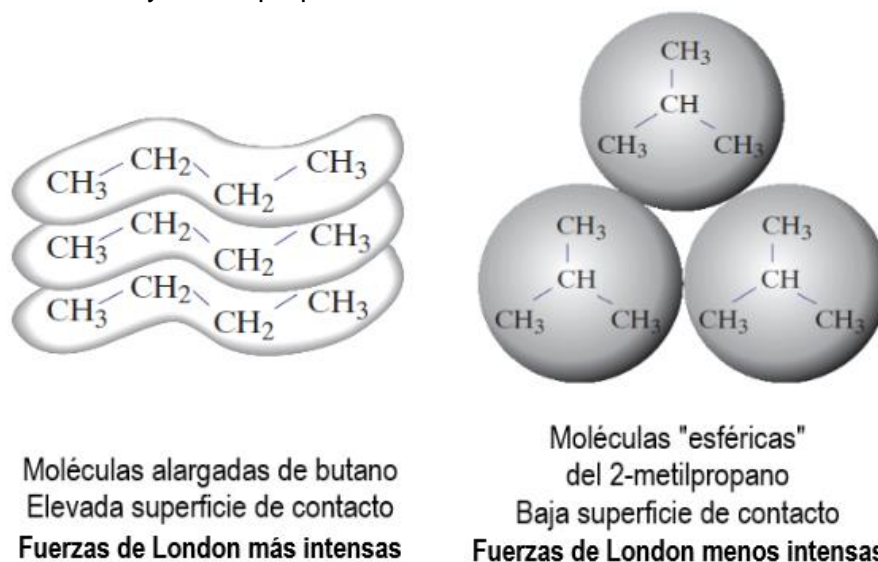


que se traducen en la aparición de pequeños **momentos dipolares transitorios** que inducen la creación, en una segunda molécula, de otro dipolo en dirección contraria que se denomina dipolo inducido. Aún cuando estos dipolos transitorios están cambiando constantemente, el resultado neto es una débil atracción entre moléculas que se denomina **Fuerza de London**.



#### Fuerzas de London. Inducción de un dipolo<sup>6</sup>

Debido a que estas fuerzas de London son de muy corto alcance y sólo actúan entre las partes de moléculas diferentes que están en contacto íntimo, es decir, entre sus superficies, serán más intensas cuanto mayor sea la superficie de contacto entre moléculas. Por lo tanto, a medida que aumenta la cantidad de átomos de carbonos e hidrógenos, el efecto aditivo de estas débiles fuerzas intermoleculares se hace cada vez más significativo. La geometría molecular de las moléculas también influye en la intensidad de las fuerzas de London como, por ejemplo, sucede con los isómeros butano y 2-metilpropano.



#### Comparación de fuerzas de London entre isómeros constitucionales<sup>7</sup>

<sup>6</sup> Imagen tomada del libro Iriondo Gabilondo, María Carmen y Martínez Layana, Francisco Javier. Apunte curso Química en Biociencias 2013. Departamento de Química - Universidad del País Vasco.

<sup>7</sup> Imagen tomada del libro SEYHAN EGE: Química Orgánica. Estructura y Reactividad. Tomo 1. Cap. 1, pág 34.

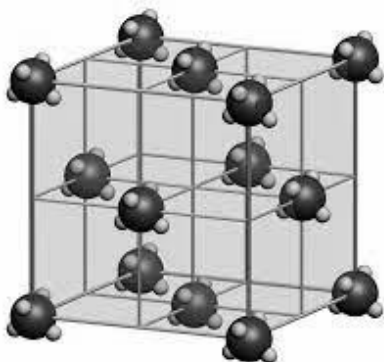
### 3.4. Propiedades físicas de las sustancias orgánicas

Ciertas propiedades de las sustancias, tales como las temperaturas y calores de cambio de fase, dependen en gran medida de las fuerzas que tienden a mantener unidas a sus moléculas y que, por ejemplo, en los procesos de fusión o ebullición deben vencerse para que las moléculas adquieran mayor libertad de movimiento. Por su parte, la solubilidad de las sustancias en diferentes disolventes viene determinada por las fuerzas de atracción que se establecen entre las moléculas de soluto y las de solvente.

En este apartado, analizaremos la relación entre estas propiedades físicas de las sustancias orgánicas y las fuerzas intermoleculares estudiadas hasta el momento, con el fin de contar con una herramienta que nos permita ya sea, explicar el comportamiento físico de sustancias de interés o bien, predecir o estimar sus propiedades a partir de la estructura de sus moléculas.

#### 3.4.1. Punto de fusión

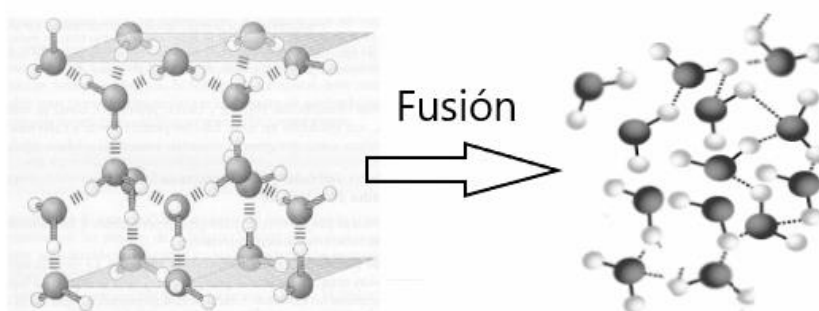
En el sólido cristalino, las partículas que actúan como unidades estructurales -iones o moléculas- se hallan vibrando en torno a posiciones fijas, ordenadas en una estructura muy regular y simétrica que se repite en el cristal, denominada **retículo o red cristalina**.



**Red cristalina formada por moléculas de metano en estado sólido**

Cuando se produce la fusión, la disposición muy ordenada de partículas en la red cristalina evoluciona a la distribución desordenada que caracteriza a los líquidos: ahora las moléculas poseen mayor velocidad y pueden deslizarse libremente unas respecto de las otras.

La fusión se produce cuando se alcanza una temperatura a la cual la energía de agitación térmica de las partículas es suficientemente grande como para que logren vencer las fuerzas que las mantienen en posición, abandonando de esta manera la red cristalina.



**Fusión del agua: moléculas ordenadas en el sólido cristalino (izq.) y moléculas en estado líquido (der.)**

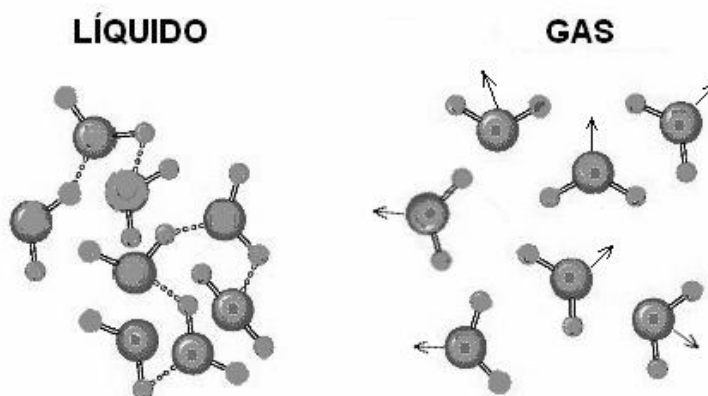


De las consideraciones anteriores, se desprende que **aquellas sustancias cuyas moléculas se atraen mediante fuerzas intermoleculares intensas presentarán puntos de fusión relativamente elevados dado que será necesario que las moléculas adquieran mayor energía térmica para abandonar las posiciones fijas que ocupan en la red cristalina del sólido.**

El efecto de las fuerzas intermoleculares sobre el punto de fusión de las sustancias moleculares se evidencia claramente al comparar los casos del agua y del metano. Mientras que el metano (PM = 16 UMA), cuyas moléculas apolares se atraen mediante las débiles fuerzas de London, funde a 91 K (-182 °C), el agua (PM = 18 UMA) lo hace a 273 K (0 °C) debido a las intensas fuerzas de puente de hidrógeno que se establecen entre sus moléculas.

### 3.4.2. Punto de ebullición

El punto de ebullición es la temperatura a la cual una sustancia cambia del estado líquido al gaseoso. En este proceso, las moléculas de la sustancia incorporan energía térmica que les permite ganar un mayor grado de libertad en sus movimientos al vencer las fuerzas que las mantenían a una distancia reducida en el estado líquido. Una vez en el estado gaseoso, las moléculas cuentan con la suficiente energía cinética como para poder alejarse de sus vecinas y desplazarse libremente por todo el espacio libre que disponen.



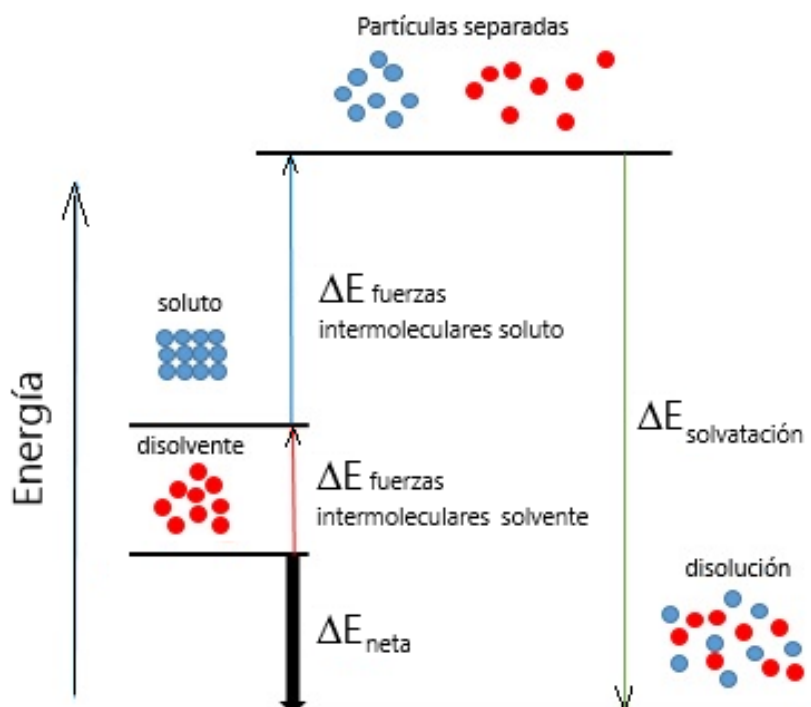
Siguiendo la línea de razonamiento que venimos desarrollando, es de esperar que la temperatura de ebullición de una sustancia dada aumente con la intensidad de las fuerzas intermoleculares. **Así, sustancias con fuerzas intermoleculares relativamente débiles como las fuerzas de London presentan, en general, puntos de ebullición menores que los correspondientes a sustancias con interacciones dipolo-dipolo y, a su vez, éstas ebullicen a menor temperatura que las sustancias cuyas moléculas se asocian por puentes de hidrógeno.**

También debe considerarse la masa y forma de las moléculas al momento de estimar el punto de ebullición de una sustancia. **Cuando dos sustancias presentan la misma clase de fuerzas intermoleculares, la que está constituida por moléculas de mayor masa y superficie de contacto será la que muestre la temperatura de ebullición más elevada.**

### 3.4.3. Solubilidad

Cuando se disuelve un sólido o un líquido, las moléculas se separan unas de otras y el espacio entre ellas pasa a ser ocupado por moléculas de disolvente. Durante la disolución, igual que en la fusión y la ebullición, debe suministrarse energía para vencer las fuerzas intermoleculares. Esta energía es aportada por la formación de enlaces entre partículas de soluto y moléculas de disolvente: las fuerzas atractivas anteriores son reemplazadas por otras nuevas.

A este proceso, en el que las moléculas de soluto se rodean de moléculas de solvente estableciéndose nuevas fuerzas de atracción entre éstas, se lo denomina **solvatación**. La condición para que un soluto se disuelva apreciablemente en determinado solvente es que la energía liberada en la solvatación sea mayor que la necesaria para separar a las moléculas del soluto y del solvente en estado puro.



Variaciones de energía involucradas en el proceso de disolución<sup>8</sup>

Teniendo esto en cuenta, cuando las moléculas de solvente sean capaces de establecer fuerzas de atracción intensas con las moléculas de soluto, es esperable que se produzca la disolución.

De lo anterior surge que la solubilidad de compuestos moleculares en un solvente dado están determinadas principalmente por su polaridad. **Las sustancias no polares o débilmente polares se disuelven en disolventes no polares o ligeramente polares; los compuestos muy polares lo hacen en disolventes de alta polaridad.**

“Una sustancia disuelve a otra similar”, es una regla empírica muy útil al momento de estimar cómo se comportarán dos sustancias al mezclarse.

<sup>8</sup> Imagen tomada de la página web <https://www.liceoagb.es/quimigen/diso3.html>



### 3.5. Guía de estudio

1. Clasifica los enlaces de cada uno de los siguientes compuestos binarios. En el caso de que sea un enlace covalente indica si es polar o apolar. De ser polar indica las densidades de cargas correspondientes sobre cada átomo.

- |                         |                 |                 |
|-------------------------|-----------------|-----------------|
| a. $\text{Cl}_2$        | c. $\text{HBr}$ | e. $\text{NaH}$ |
| b. $\text{H}_2\text{O}$ | d. $\text{CaS}$ | f. $\text{HCl}$ |

2. Dibuja las fórmulas tridimensionales y las cargas parciales para predecir en los siguientes compuestos la dirección de la polarización de los enlaces covalentes y el momento dipolar global.

- |  |  |
|--|--|
| a. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$ | h. $\text{CH}_3\text{CCCH}_3$                                |
| b. trans- $\text{CHClCHCl}$            | i. $\text{N}(\text{CH}_3)_3$                                 |
| c. cis- $\text{CHClCHCl}$              | j. $\text{CH}_3\text{COCH}_3$                                |
| d. $\text{CH}_3\text{OH}$              | k. $\text{HCONH}_2$  |
| e. $\text{CHCl}_2\text{CH}_3$          | l. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$                         |
| f. $\text{CH}_2=\text{CBr}_2$          | m. $\text{CH}_2(\text{OH})\text{CH}_2\text{CH}_2(\text{OH})$ |
| g. $\text{CH}_3\text{OCH}_3$           |  |

3. Dibuja la estructura tridimensional y determina el momento dipolar de dos moléculas de  $\text{FM}=\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$  sabiendo que una es polar y la otra apolar.

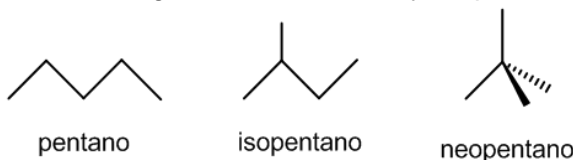
4. ¿Cuáles de los siguientes compuestos presentan interacciones intermoleculares por puente de hidrógeno?

- |   |  |
|---|--|
| a. $\text{CH}_2\text{F}_2$                      | d. $\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ |
| b. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ | e. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$            |
| c. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_3$         | f. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CONH}_2$                     |

5. ¿Cuál de los siguientes compuestos formará interacciones por puente de hidrógeno con el agua? En cada caso, indica si puede actuar como donador, aceptor o donador y aceptor de la interacción por puente de hidrógeno. Ilustra los razonamientos con dibujos.

- |   |                                       |
|---|---------------------------------------|
| a. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_3$ | d. $\text{CH}_3\text{S}=\text{OCH}_3$ |
| b. $(\text{CH}_3\text{CH}_2)_3\text{N}$ | e. $\text{CH}_3\text{COOH}$           |
| c. $\text{CH}_3\text{CONHCH}_3$         | f. $(\text{CH}_3)_2\text{CCHCl}$      |

6. Observa la estructura de las siguientes moléculas y responde:



- ¿Cuál es más polar? ¿Cómo son sus pesos molares?
- ¿Qué tipo de interacción intermolecular presentan puras?
- ¿Cuál necesitará más energía para separar sus moléculas y pasar al estado gaseoso? ¿Por qué?

# Química Orgánica I

## Química orgánica

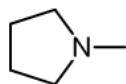
7. Para cada conjunto de compuestos, prediga qué compuesto tendrá el punto de ebullición más alto y cuál el más bajo. Justifica tus respuestas.

- |  |   |   |
|--|---|---|
| a. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ | $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ | $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$           |
| b. $\text{CH}_3\text{CH}_3$                                  | $\text{CH}_3\text{SH}$                                  | $\text{CH}_3\text{OH}$                                    |
| c. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$                       | $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$          | $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ |

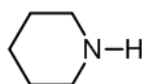
8. El dietiléter y el 1-butanol son isómeros constitucionales y tienen solubilidades parecidas en agua. Sin embargo, sus puntos de ebullición son muy diferentes. Explica por qué estos dos compuestos tienen propiedades de solubilidad parecidas pero puntos de ebullición demasiado distintos.

- *Dietiléter,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$  = Punto de eb: 35 °C. Solubilidad 8,4 mL se disuelven en 100 mL de  $\text{H}_2\text{O}$ .*
- *1-butanol  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$  = Punto de eb: 118 °C. Solubilidad 9,1 mL se disuelven en 100 mL de  $\text{H}_2\text{O}$ .*

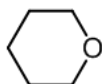
9. Explica a qué se debe la diferencia en los puntos de ebullición que presentan estos pares de isómeros:



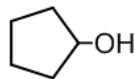
a. N-metilpirrolidina, P. eb.= 81 °C



piperidina, P. eb.= 106 °C



b. tetrahidropirano, P. eb.= 88 °C



ciclopentanol, P. eb.= 141 °C

10. Prediga, para cada par de compuesto, cuál de ellos va a ser más soluble en agua. Justifica tu respuesta.

- |  |   |   |
|--|---|---|
| a. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl}$                       | ó | $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$                       |
| b. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SH}$ | ó | $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ |
| c. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}$                     | ó | $\text{CH}_3\text{COOCH}_3$                             |

## Bibliografía

- MORRISON, R. T. y BOYD, R. N.: *Química Orgánica* (5ª ed). ISBN: 9684443404, Ed. Pearson. 1998.
- SEYHAN EGE: *Química Orgánica. Estructura y Reactividad. Tomo 1*. ISBN: 9788429170634. Ed. Reverté. Barcelona, 1997.
- SOLADANI, M; CACCIA, R y ÁVILA, A. *Introducción a la Química Orgánica*. Química 4º año. Departamento de Química. IPS. 2014.
- WADE, L. G.: *Organic Chemistry* (8ª ed.). ISBN: 978-0-321-76841-4, Prentice Hall, 2012.