



QUÍMICA ORGÁNICA I

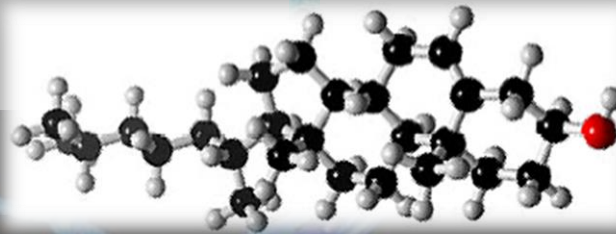
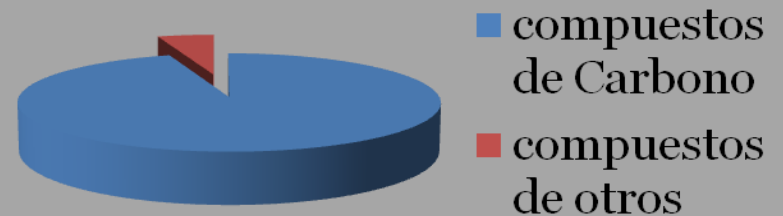
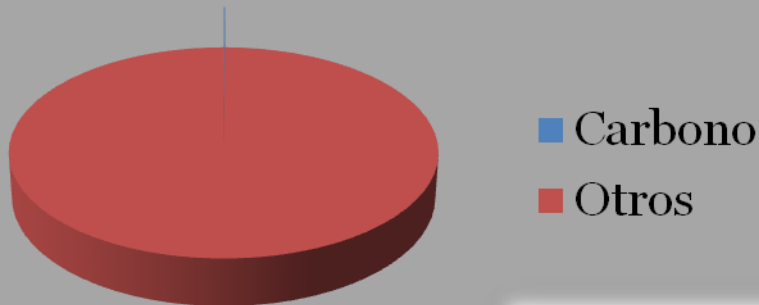
Florencia Grasso
fgrasso@agro.unc.edu.ar

Hibridación
Enlace
Polaridad

La vida se construye alrededor del carbono

La corteza terrestre contiene un 0.1 % de carbono ...

...pero los compuestos orgánicos suponen un 95% de los conocidos

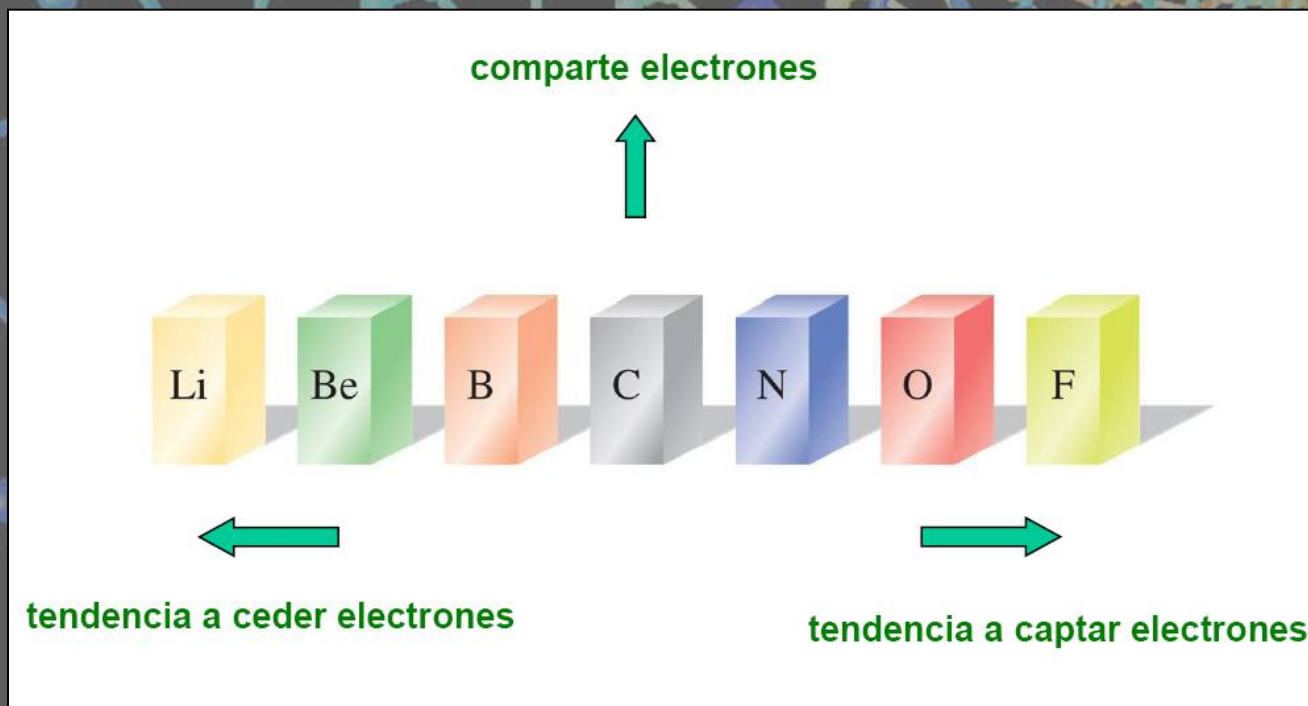


El carbono es el elemento clave alrededor del cual se construye el proceso de la vida

QUIMICA ORGANICA

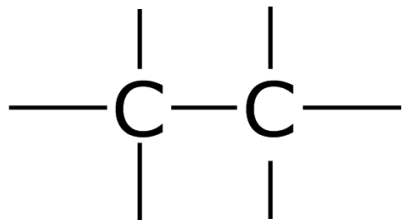
compuestos del carbono

enlaces
covalentes

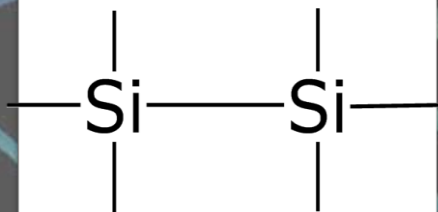


Las cadenas de carbono son muy estables

- ❑ El carbono tiene una facilidad única para formar enlaces fuertes con otros átomos de carbono.
- ❑ Puede formar cadenas tridimensionales.
- ❑ Puede establecer enlaces múltiples consigo mismo.
- ❑ Puede formar enlaces fuertes con otros átomos como H, O, N.

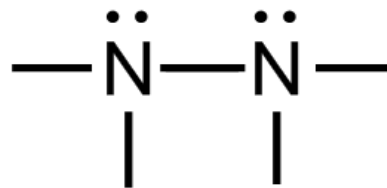


83 kcal/mol



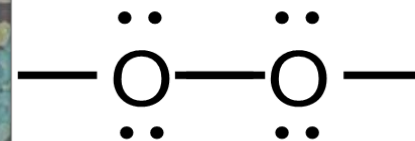
53 kcal/mol

Átomos más grandes,
mayor distancia de
enlace



40 kcal/mol

Repulsión de pares
electrónicos no
enlazados



34 kcal/mol.

Repulsión de 2 pares
electrónicos no
enlazados



<i>Característica</i>	<i>Compuestos orgánicos</i>	<i>Compuestos inorgánicos</i>
Composición	Principalmente formados por carbono, hidrógeno, oxígeno y nitrógeno.	Formados por la mayoría de los elementos de la tabla periódica.
Enlace	Predomina el enlace covalente.	Predomina el enlace iónico.
Solubilidad	Soluble en solventes no polares como benceno.	Soluble en solventes polares como agua.
Conductividad eléctrica	No la conducen cuando están disueltos.	Conducen la corriente cuando están disueltos.
Puntos de fusión y ebullición.	Tienen bajos puntos de fusión o ebullición.	Tienen altos puntos de fusión o ebullición.
Estabilidad	Poco estables, se descomponen fácilmente.	Son muy estables.
Estructuras	Forman estructuras complejas de alto peso molecular.	Forman estructuras simples de bajo peso molecular.
Velocidad de reacción	Reacciones lentas	Reacciones casi instantáneas
Isomería	Fenómeno muy común.	Es más raro este fenómeno

sustancias orgánicas

```
graph TD; SO(sustancias orgánicas) --> PQ(propiedades químicas); SO --> PF(propiedades físicas); PQ --> EI(enlaces intramoleculares); EI --> E[eñe iónico]; EI --> EC[eñe covalente]; EI --> ECOR[eñe coordinativo]; EI --> EN(electronegatividad); PF --> FI(fuerzas intermoleculares); FI --> I[interacciones iónicas]; FI --> ID[interacción ión-dipolo]; FI --> PH[puente de hidrógeno]; FI --> DD[dipolo-dipolo permanente]; FI --> EN2(polaridad); EN2 --> G[geometría]; EN2 --> H[hibridación]; FI --> EI; EN2 --> G; EN2 --> H;
```

propiedades químicas

propiedades físicas

enlaces intramoleculares

fuerzas intermoleculares

- ☑ enlace iónico
- ☑ enlace covalente
- ☑ enlace coordinativo

- ☑ interacciones iónicas
- ☑ interacción ión-dipolo
- ☑ puente de hidrógeno
- ☑ dipolo-dipolo permanente

electronegatividad

polaridad

geometría

hibridación

¿Porqué se enlazan dos átomos?

Para adquirir mayor
estabilidad

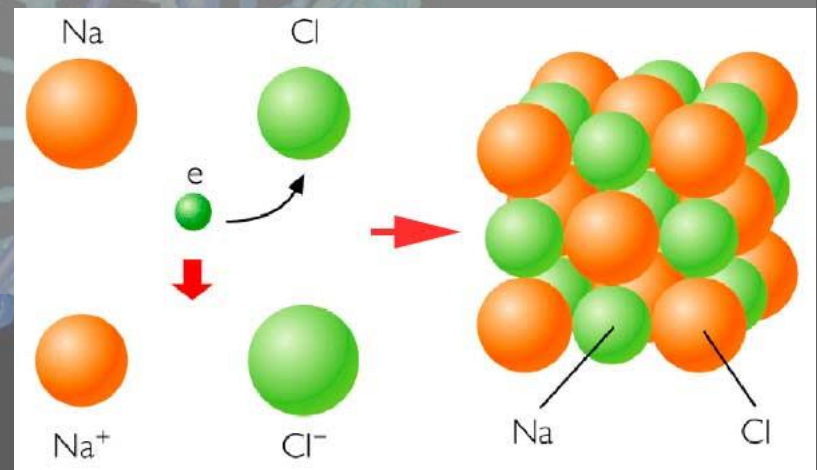


TEORÍA DE LEWIS

Los átomos se combinan para adquirir una configuración más estable, es decir, es isoelectrónico con un gas noble (regla del octeto)

Enlace iónico

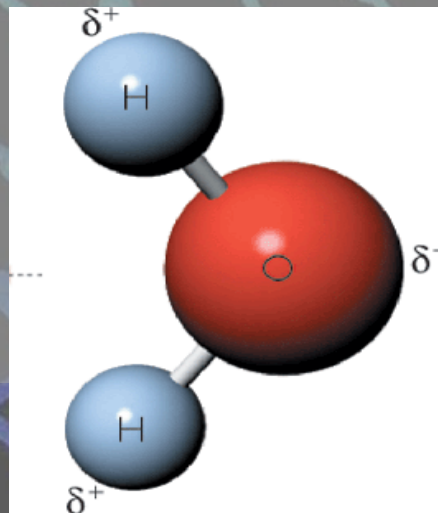
- Hay transferencia neta de electrones
- Se forman aniones y cationes
- Se produce entre elementos de electronegatividades muy diferentes
- Enlace no direccional
- Enlace → atracción electrostática entre iones de carga opuesta
- Fórmula empírica
- Ejemplo: NaCl
(sal de mesa)



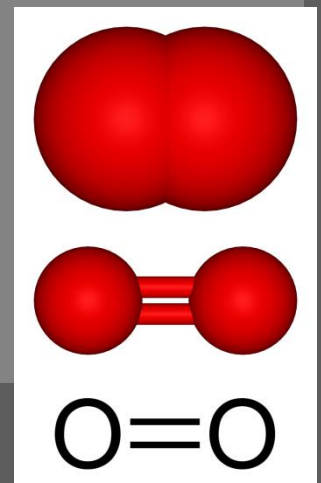
Enlace covalente

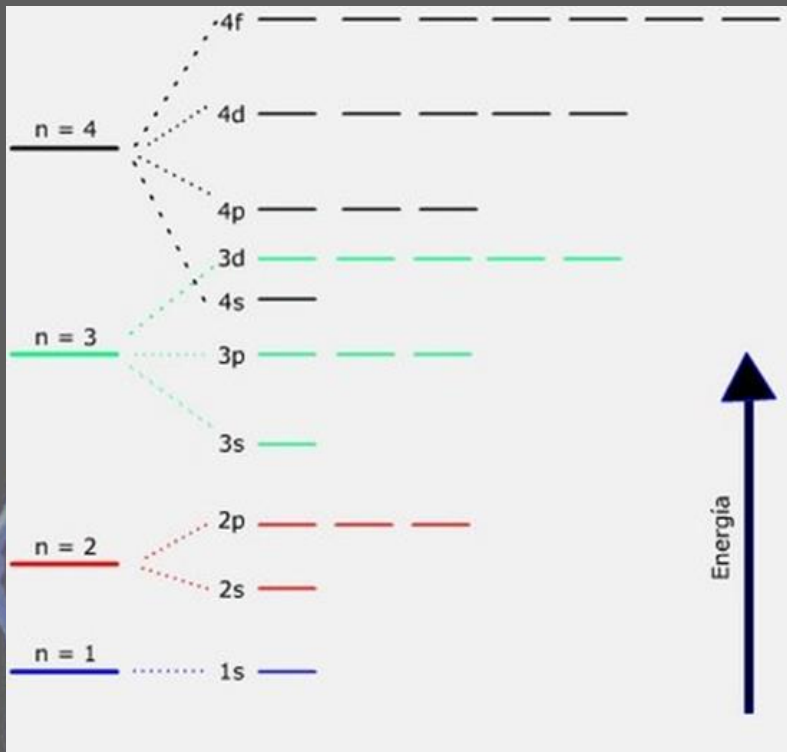
- No hay transferencia neta de electrones
- Se comparten los electrones de valencia
- Se produce entre elementos de electronegatividades similares
- El enlace es altamente direccional
- Pueden ser covalentes polares o apolares
- Ejemplos:

agua

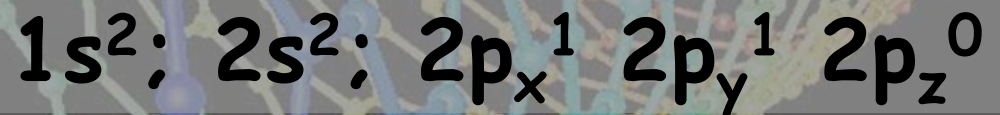


oxígeno

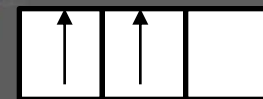




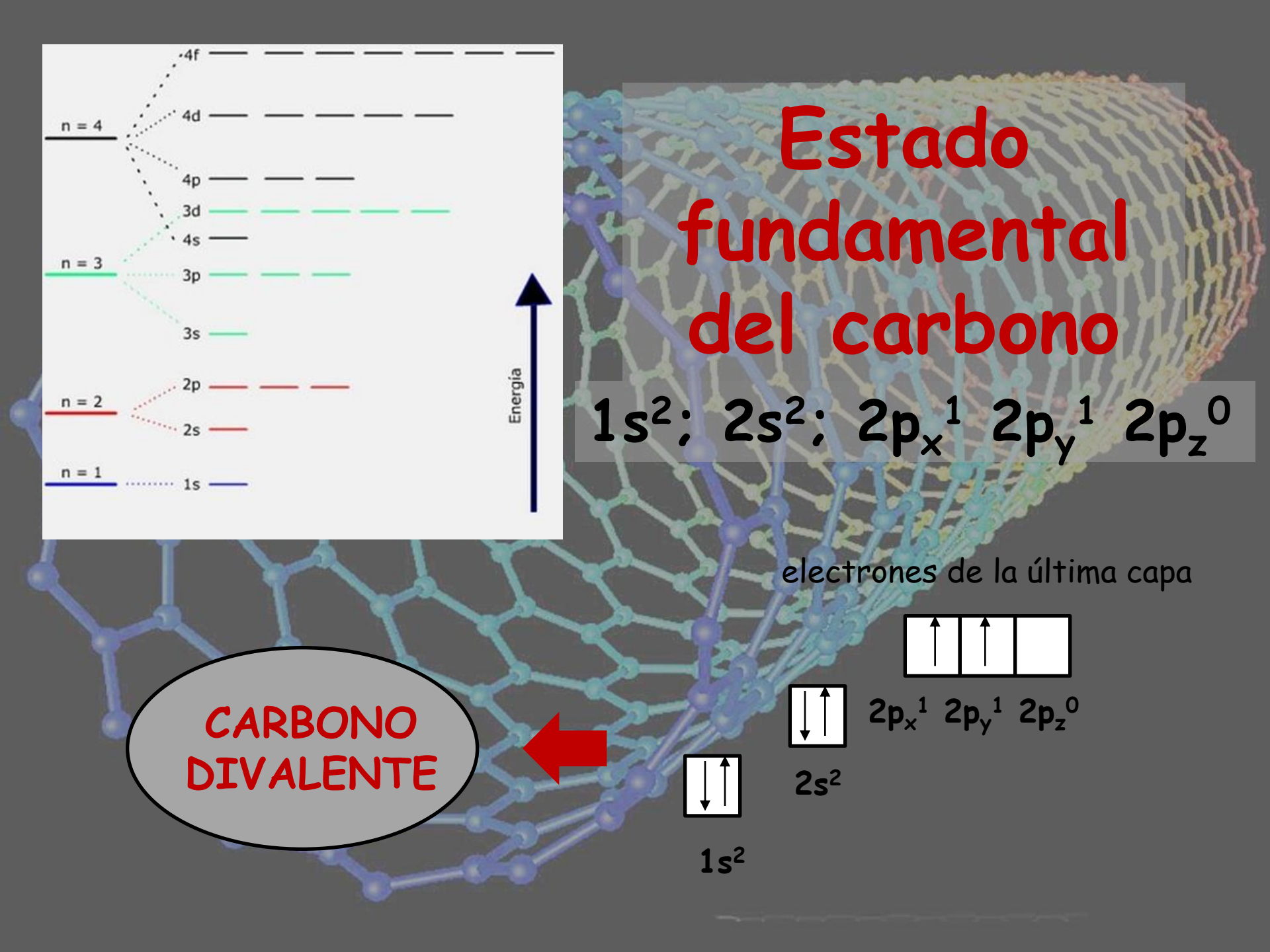
Estado fundamental del carbono



electrones de la última capa



CARBONO DIVALENTE



HIBRIDACIÓN



Combinación de orbitales atómicos para formar nuevos orbitales híbridos.

Consecuencias

- Mayor separación entre nubes electrónicas.
- Enlaces más fuertes por mayor traslape.
- Explica la geometría molecular observada.

Teoría del enlace de valencia (TEV)
Teoría del orbital molecular (TOM)

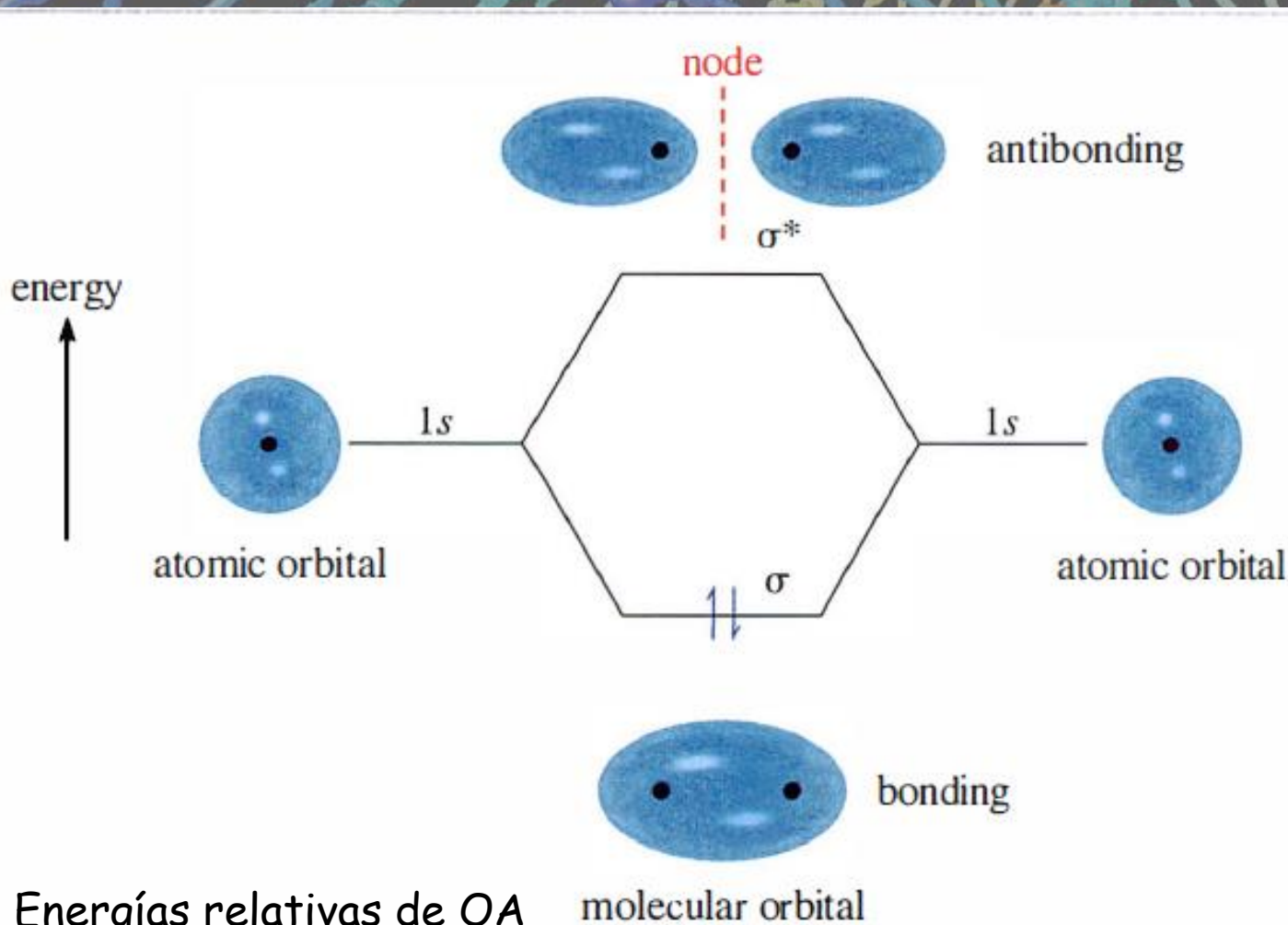
Teoría del enlace de valencia

- ❑ Los enlaces covalentes se forman por traslape de dos orbitales atómicos, cada uno de los cuales contiene un electrón. Los espines de los dos electrones son opuestos.
- ❑ Cada átomo enlazado retiene sus orbitales atómicos, pero el par de electrones en los orbitales atómicos es compartido por ambos átomos.
- ❑ Mientras mayor es el traslape de orbitales, el enlace es más fuerte.

Teoría del orbital molecular

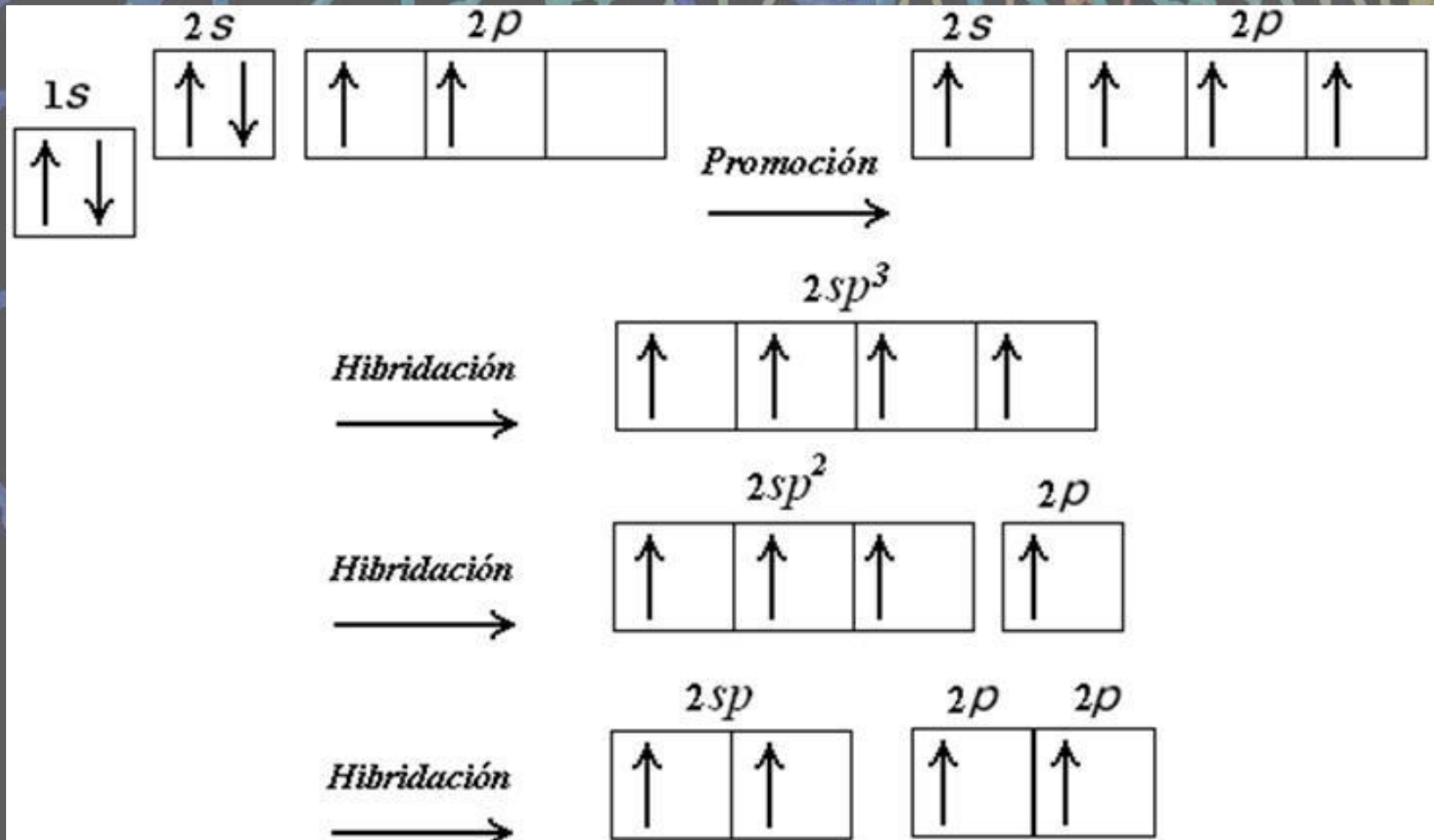
- ❑ Los OM describen regiones del espacio en una molécula en la cual es más probable encontrar electrones y tienen forma, tamaño y niveles de energía específicos.
- ❑ Los OM se forman combinando OA. La cantidad de OM es igual a la cantidad de OA que se combinan.
- ❑ Los OM que tienen menos energía que los OA iniciales son de **enlace**; los que tienen más energía son **antienlazantes** y los que tienen la misma energía son de **no enlace**.

Teoría del orbital molecular

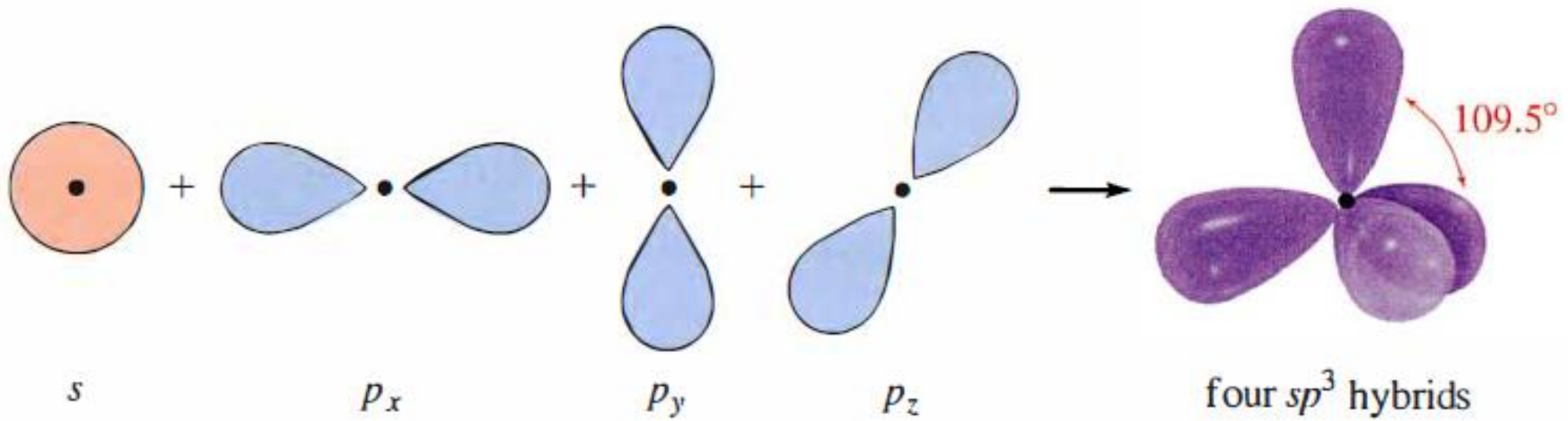


Energías relativas de OA
y OM para el hidrógeno

HIBRIDACIÓN

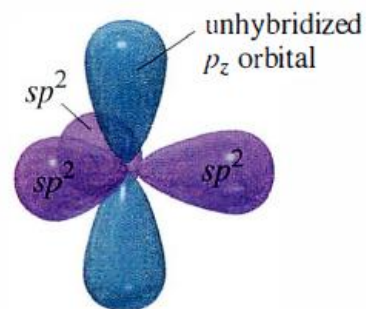
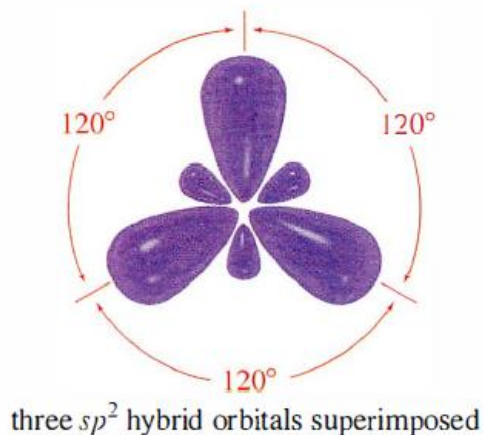
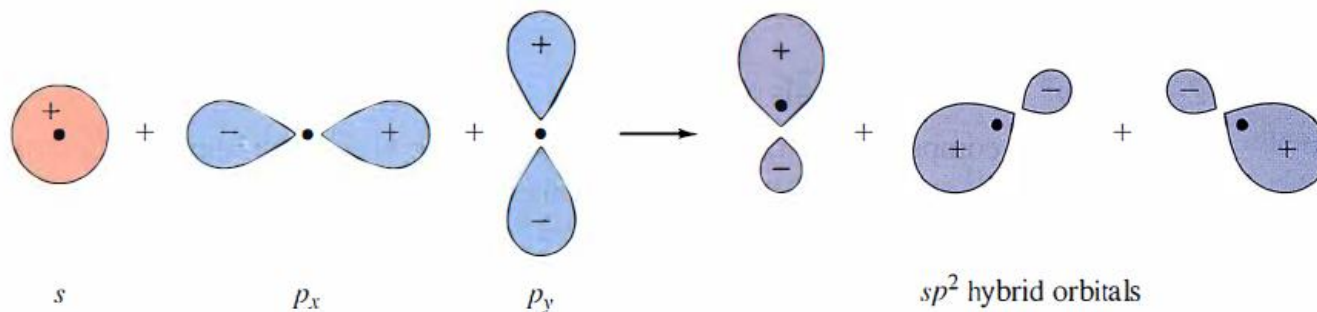


HIBRIDACIÓN - sp^3



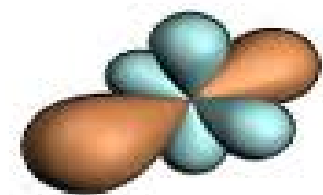
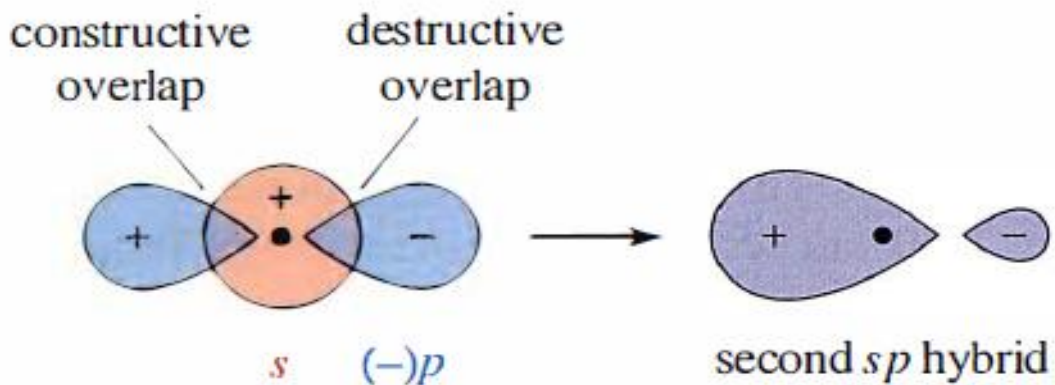
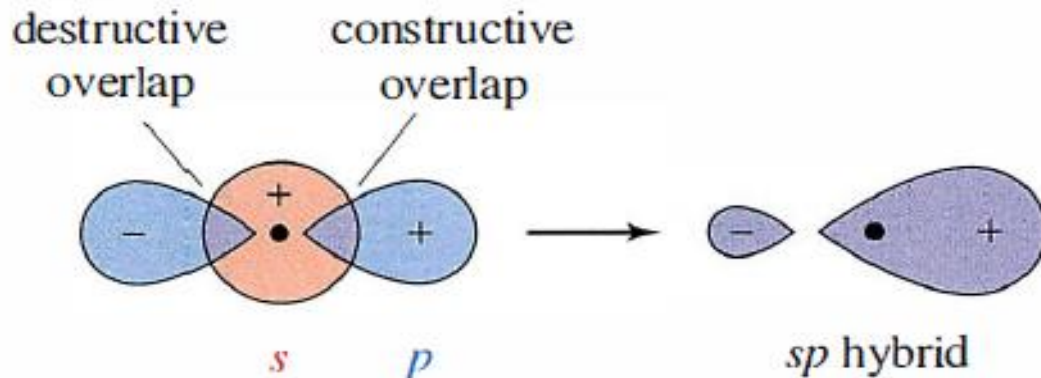
1 orbital s + 3 orbitales p \rightarrow 4 orbitales híbridos sp^3 (25% carácter s y 75 % carácter p)

HIBRIDACIÓN - sp^2



1 orbital s + 2 orbitales p → 3 orbitales híbridos sp^2 (33% carácter s y 67 % carácter p)
1 orbital p sin hibridizar 1 orbital p puro

HIBRIDACIÓN -sp



Átomo de carbono con hibridación *sp*

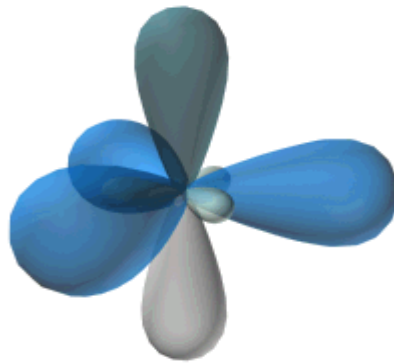
1 orbital *s* + 1 orbital *p* → 2 orbitales híbridos *sp* (50% carácter *s* y 50 % carácter *p*)
2 orbitales *p* sin hibridizar 2 orbital *p* puro

HIBRIDACIÓN

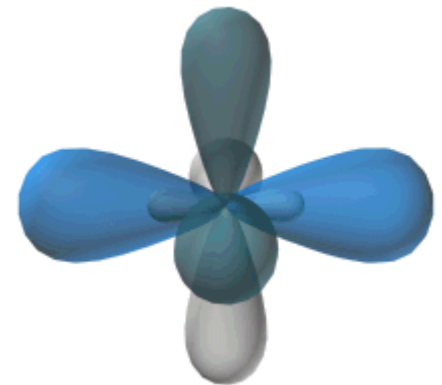
Tipo de hibridación	Geometría molecular	Ángulo de enlace
sp^3	Tetraédrica	109.5°
sp^2	Triangular plana	120°
sp	Lineal	180°



sp^3

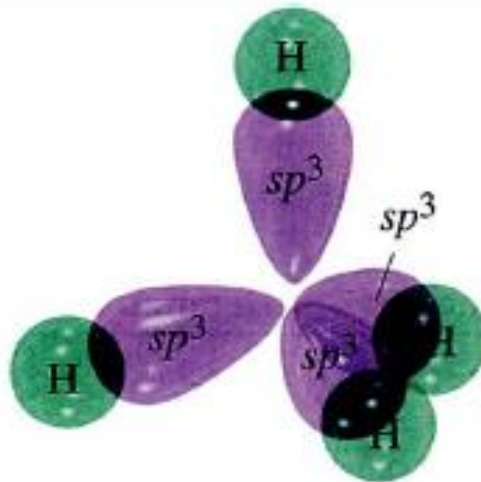
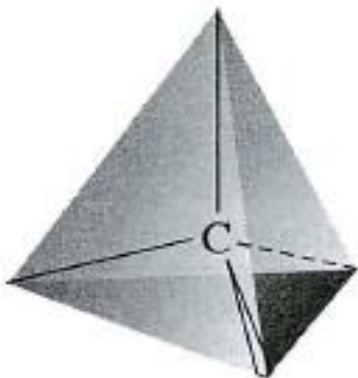
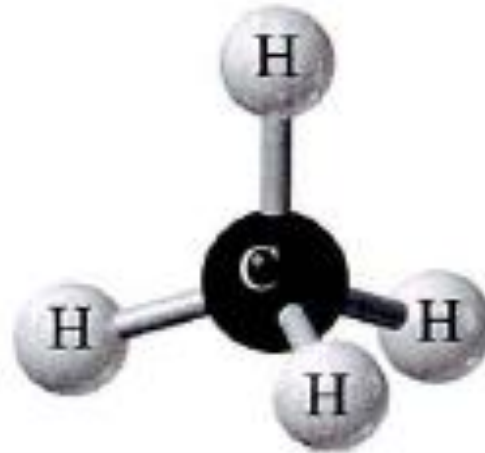
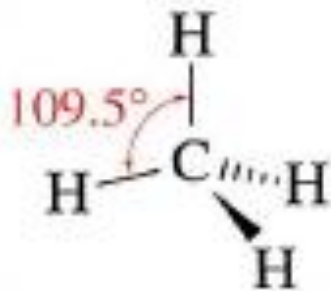


sp^2

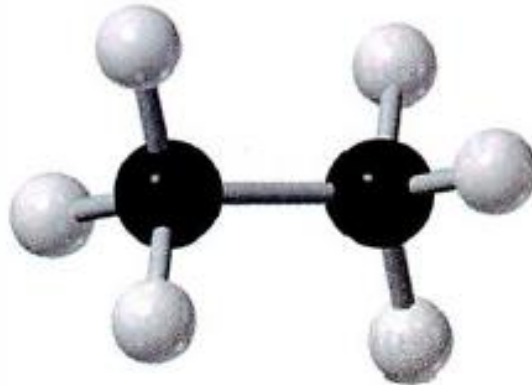
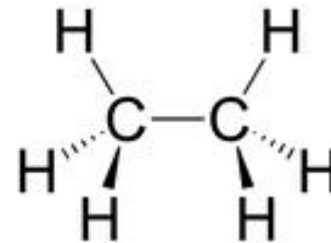
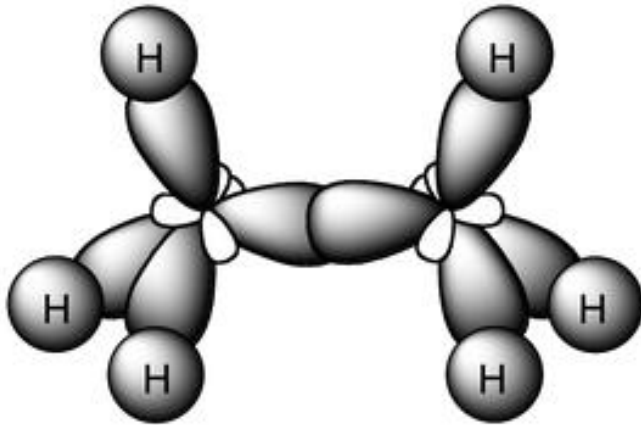


sp

Metano: hibridación y enlaces



Etano: hibridación y enlaces

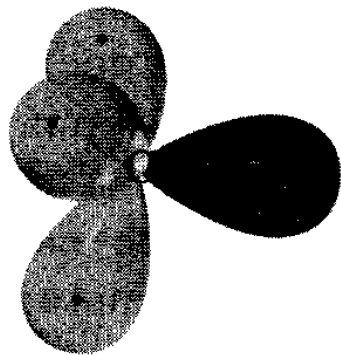


ethane

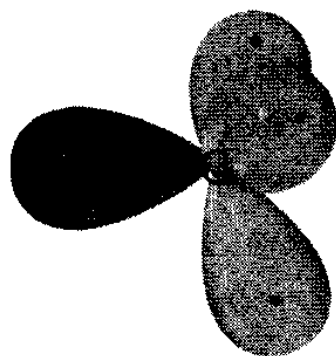


ethane

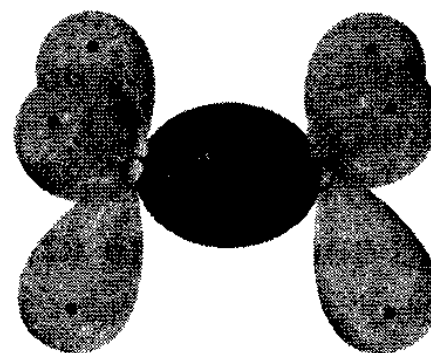
Enlace sigma (σ)



Carbono sp^3



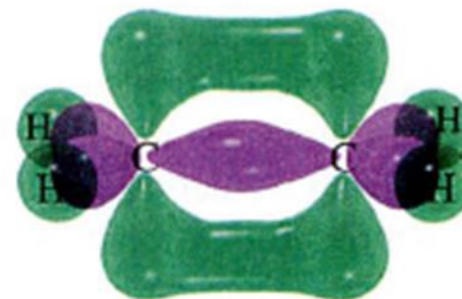
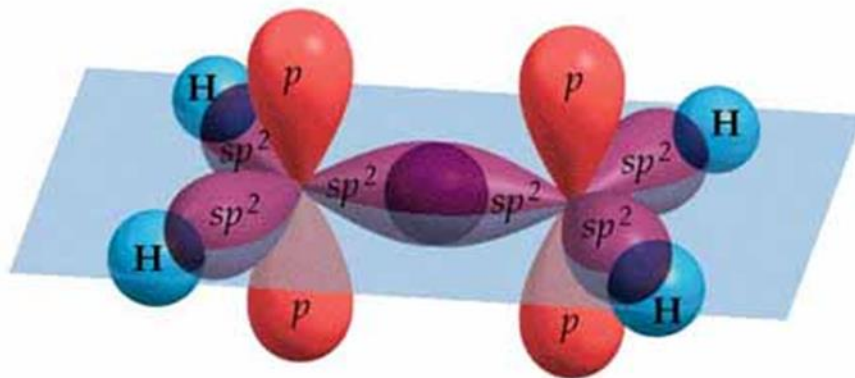
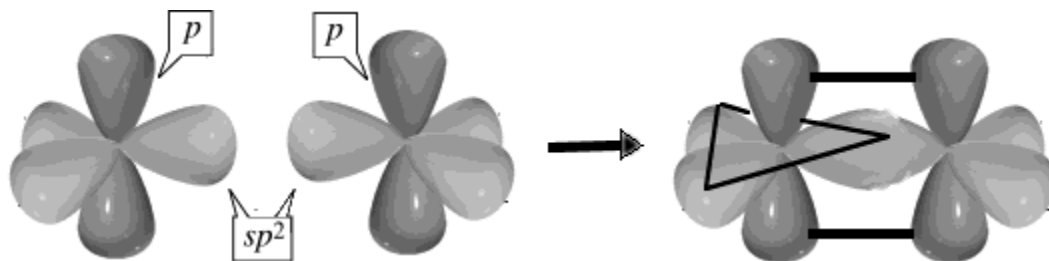
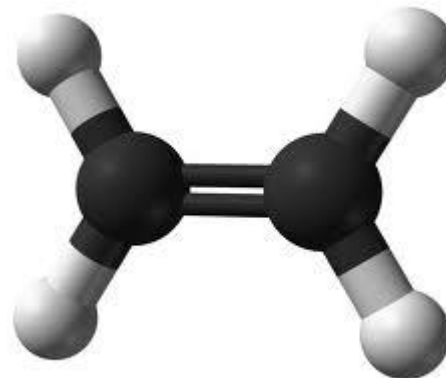
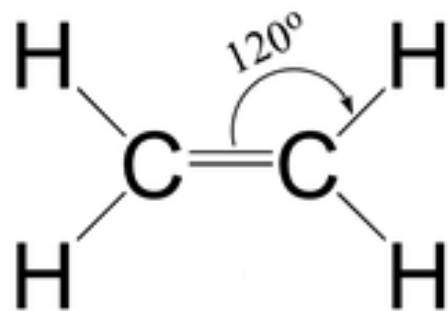
Carbono sp^3



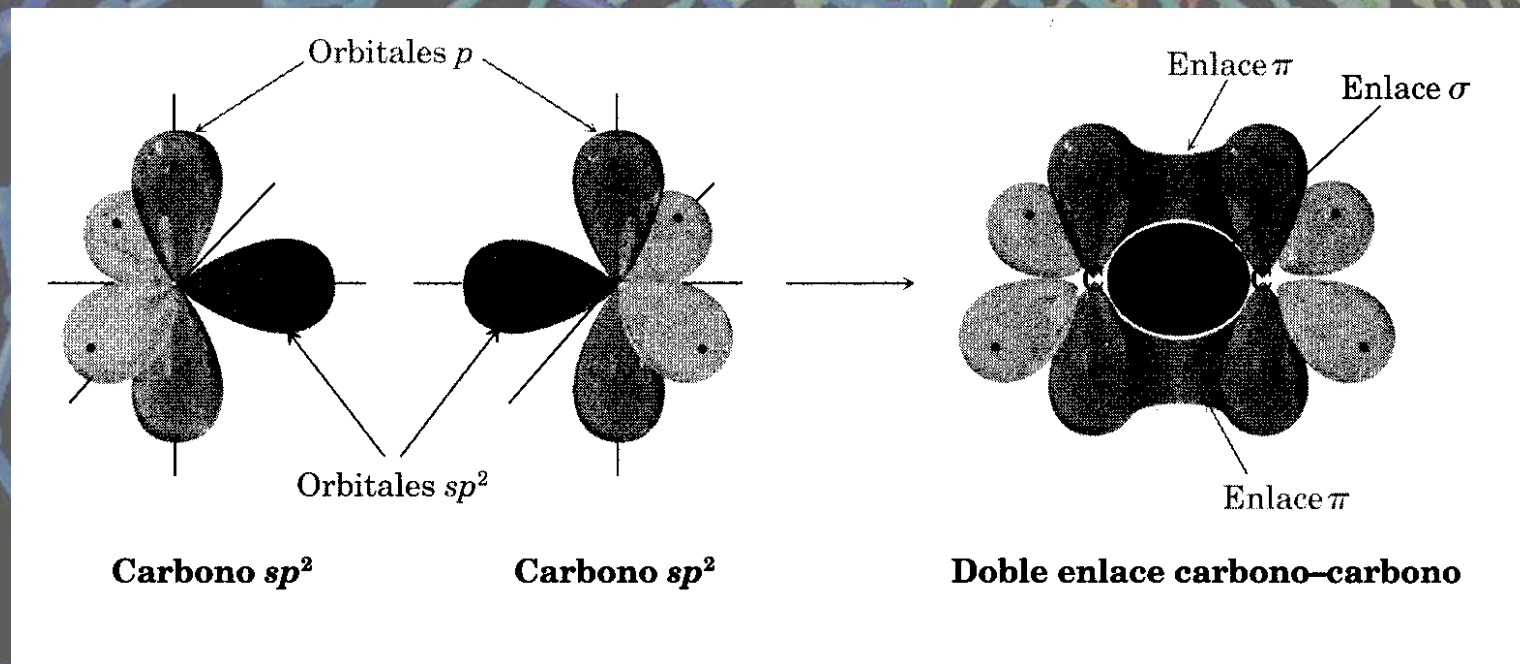
Enlace σsp^3-sp^3

- ❖ Solapamiento frontal
- ❖ Fuerte atracción de los e^- por los núcleos
- ❖ Rotación libre en torno al eje

Eteno

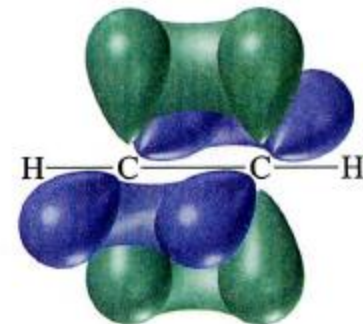
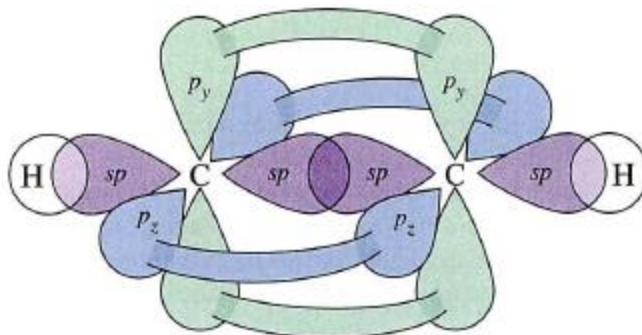
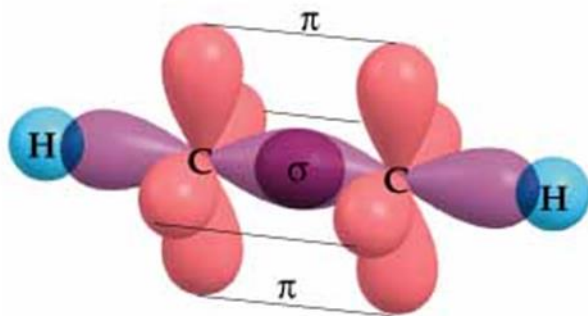
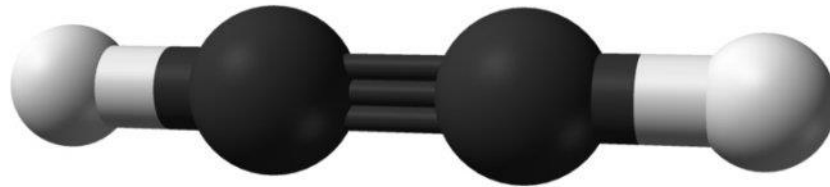
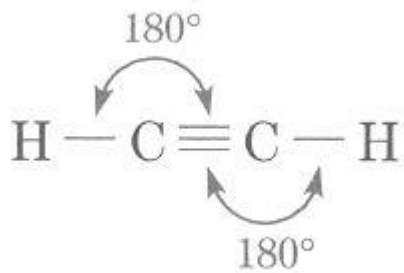


Enlace pi (π)

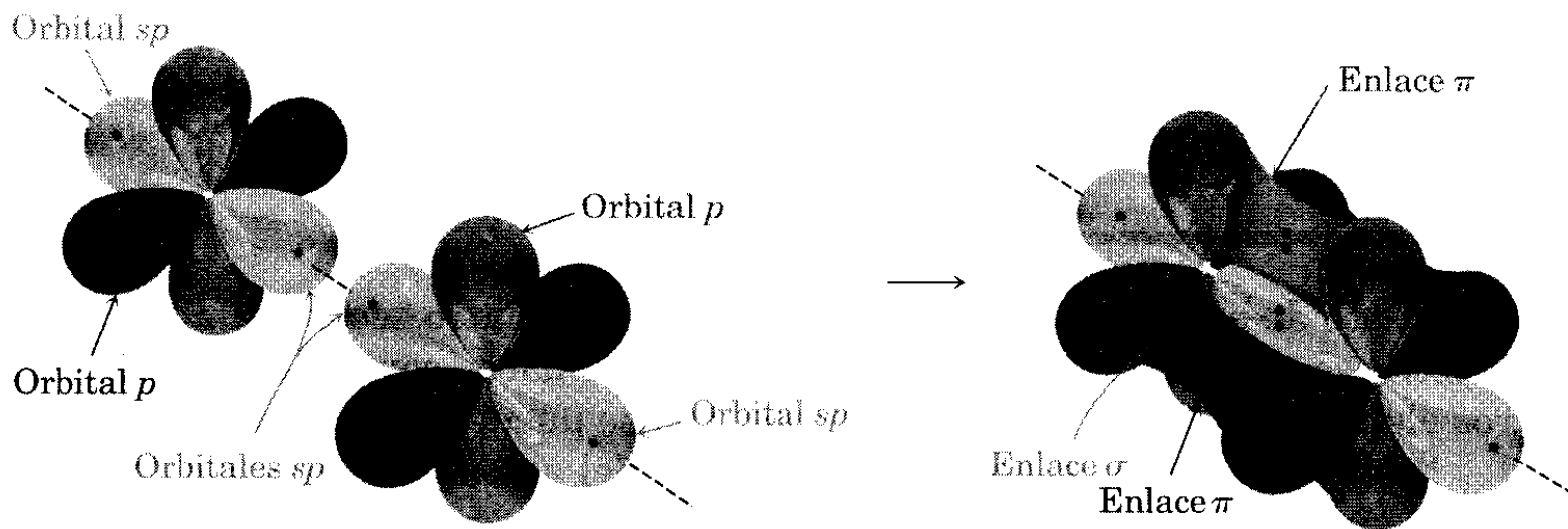


- ❖ Solapamiento lateral
- ❖ Menor atracción de los e^- por los núcleos
- ❖ Rotación impedida

Etino

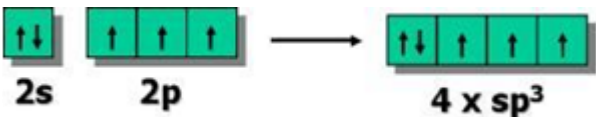
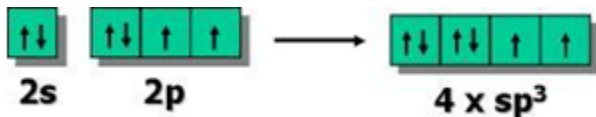
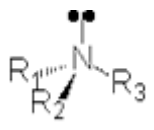
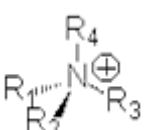
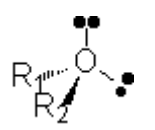
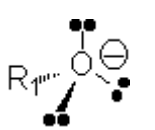


Enlace pi (π)



Triple enlace carbono-carbono

Hibridación de otros átomos

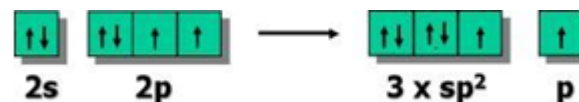
sp ³ Nitrógeno			sp ³ Oxígeno		
					
Estructura			Estructura		
Tipo	Aminas	Sales de amonio	Tipo	Alcoholes Éteres	Alcóxidos
Geometría	Piramidal	Tetraédrica	Geometría	Angular	-

Hibridación de otros átomos

sp² Nitrógeno



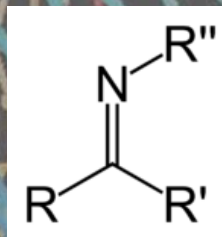
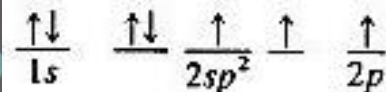
sp² Oxígeno



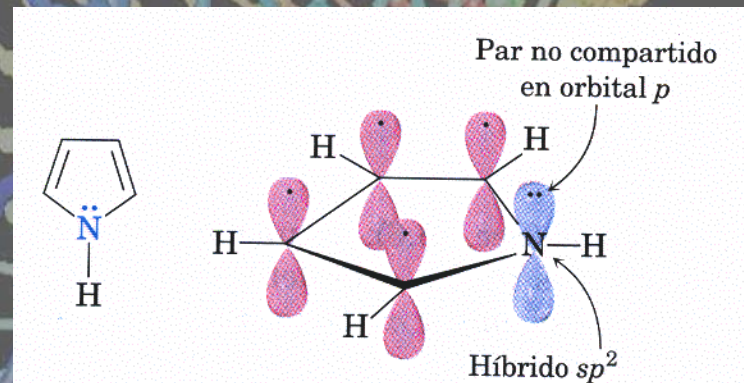
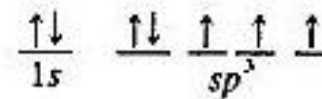
Estructura		Estructura		
Tipo	Iminas	Tipo	Sales de imonio	Carbonilos
Geometría	Trigonal plana	Geometría	Angular	Trigonal plana

Hibridación de otros átomos

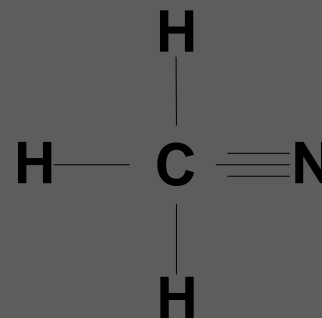
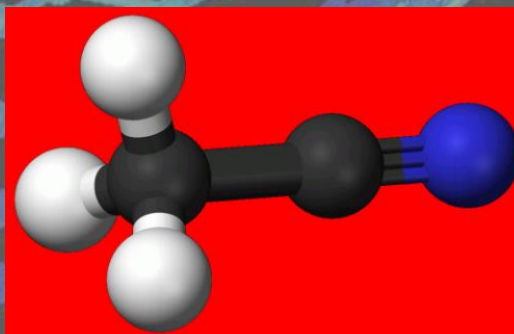
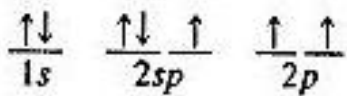
NITROGENO



Hibridación sp^2

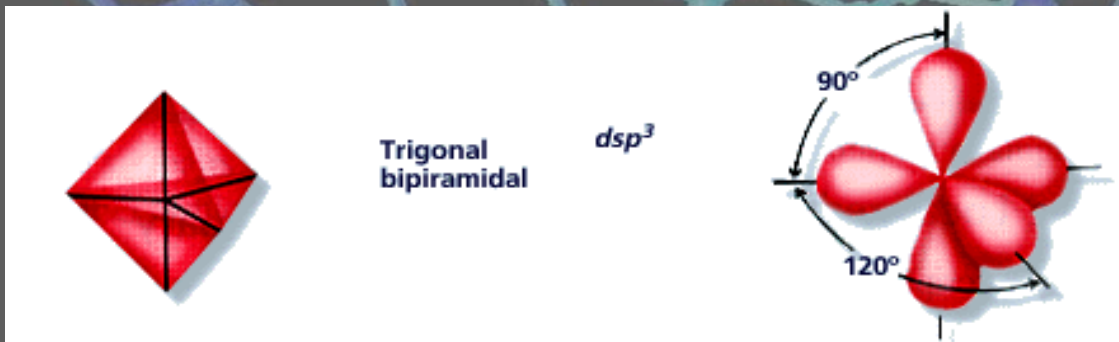
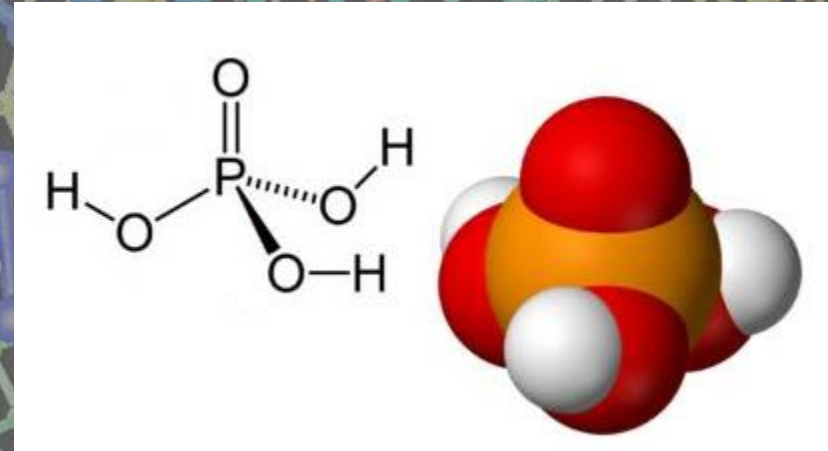
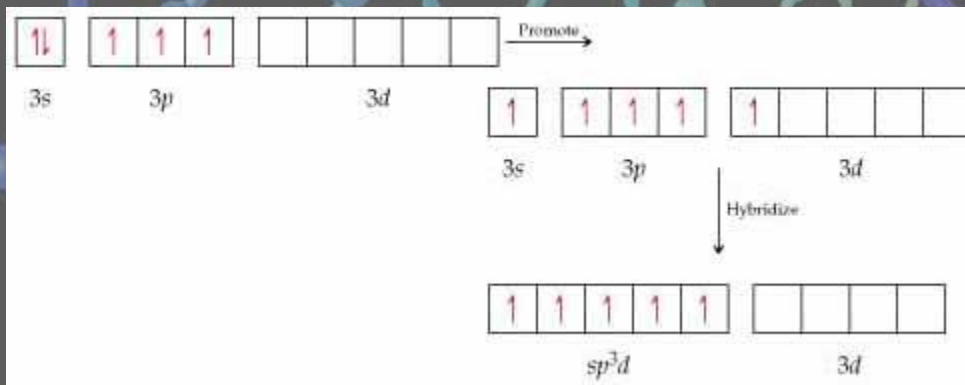


Hibridación sp



Hibridación de otros átomos

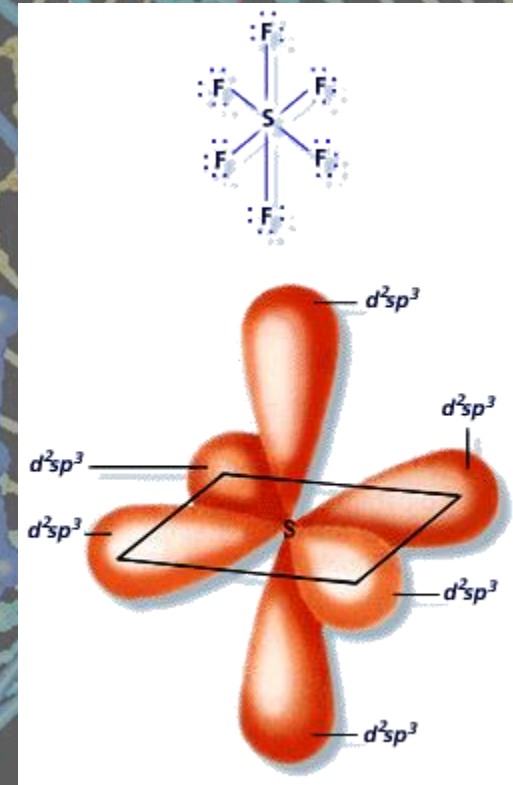
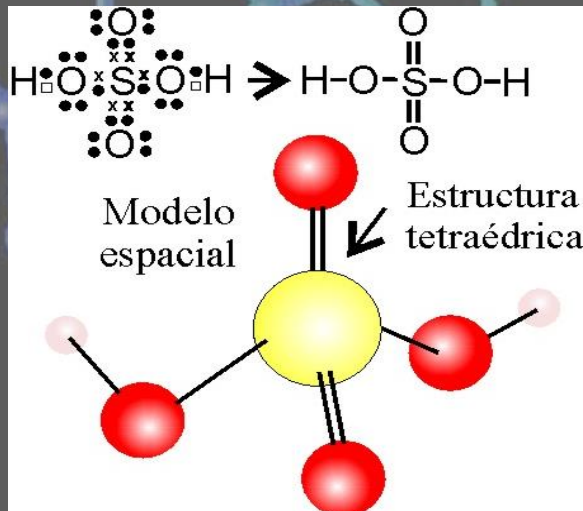
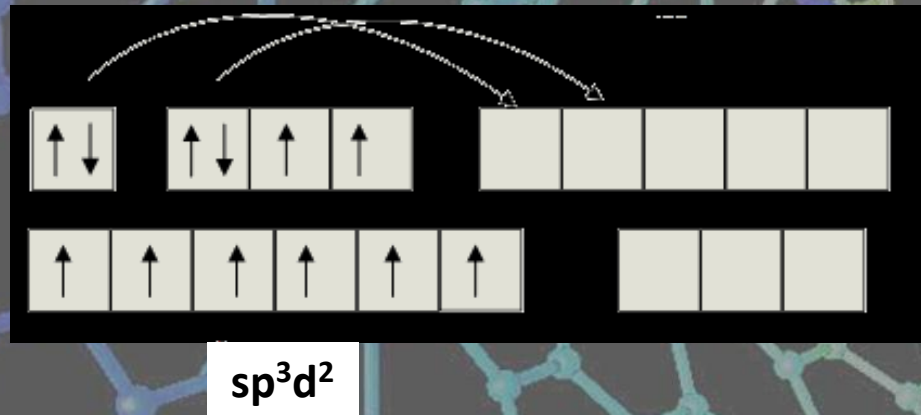
FÓSFORO



En el caso de formar un doble enlace, el enlace múltiple se realiza con el orbital puro d formando un $d\pi$ y la geometría adquiere forma tetraédrica. Ej.. H_3PO_4

Hibridación de otros átomos

AZUFRE



Los enlaces múltiples los forma con los orbitales d, generando una geometría aproximadamente tetraédrica. Ej.: H_2SO_4 .

Polaridad de las moléculas



□ Polaridad de los enlaces individuales

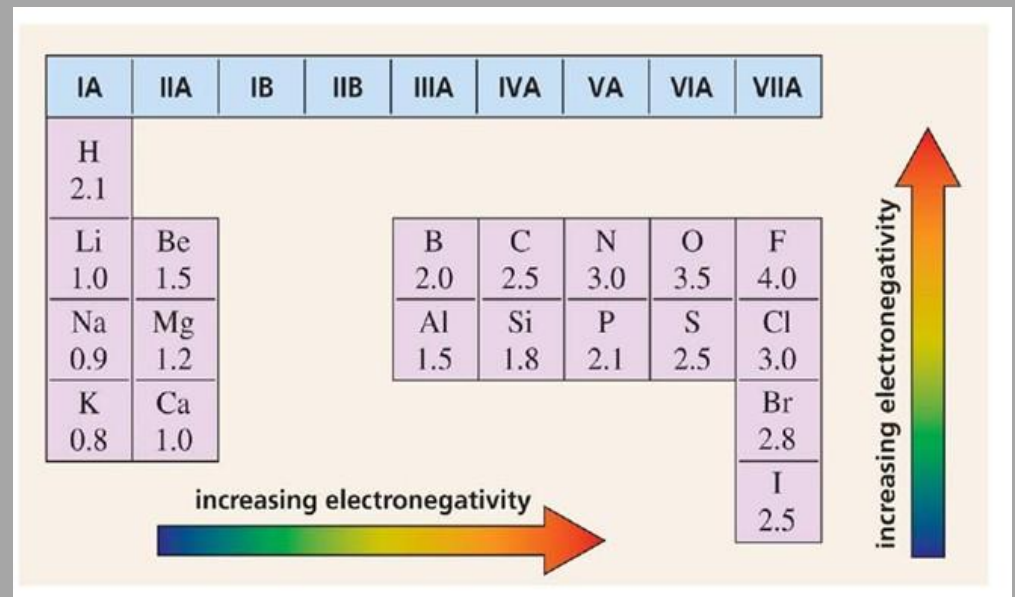


Electronegatividad

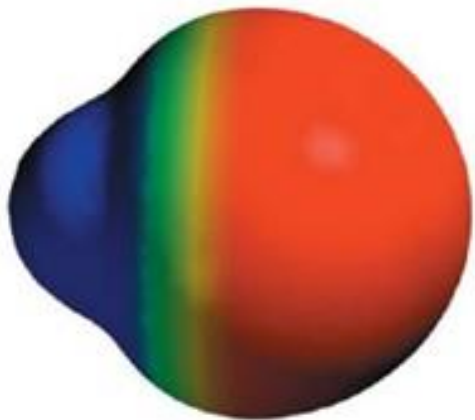
□ Geometría



Hibridación



Polaridad de enlace



Li-H



H-H



H-F



mayor potencial
electrostático negativo

mayor potencial
electrostático positivo

Polaridad de enlace

Continuo de tipos de enlace

Enlace covalente no polar



$\Delta\text{EN} =$ 0.4 0.4

Enlace covalente polar



1.4 0.9

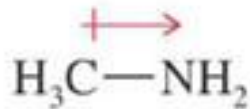
Enlace iónico



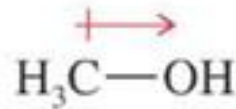
3.2 2.1



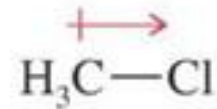
etano



metilamina



metanol



clorometano



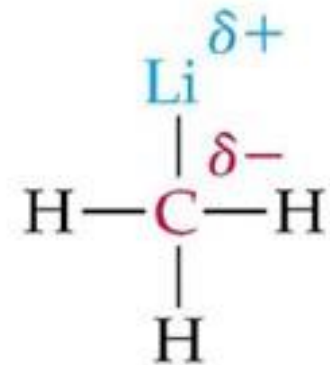
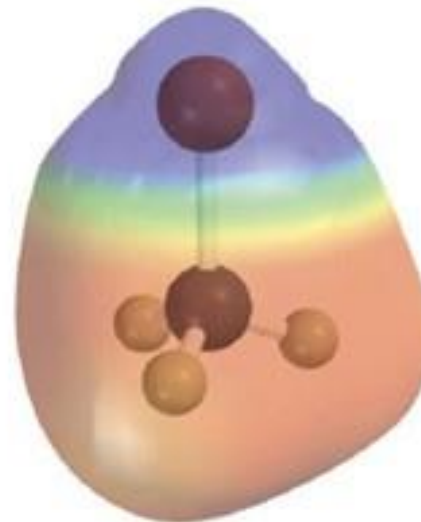
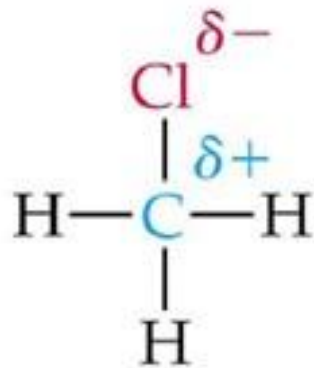
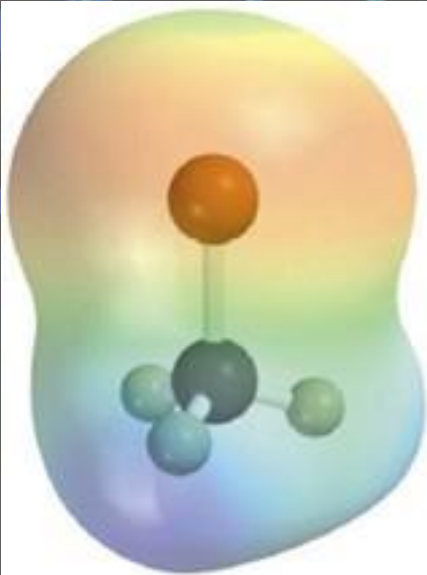
covalente
apolar

increasing polarity

iónico

Polaridad de enlace

Dirección de distintos dipolos en los que participa el CARBONO



Momento dipolar



$$\mu = q \cdot d$$

Donde:

μ = momento dipolar (C.m)

q = porcentaje de las cargas compartidas que son atraídas por el átomo (C, culombio).

d = distancia que separa las cargas (m)

$$1 \text{ C} \cdot \text{m} = 2.9979 \times 10^{29} \text{ D}$$

Momento dipolar

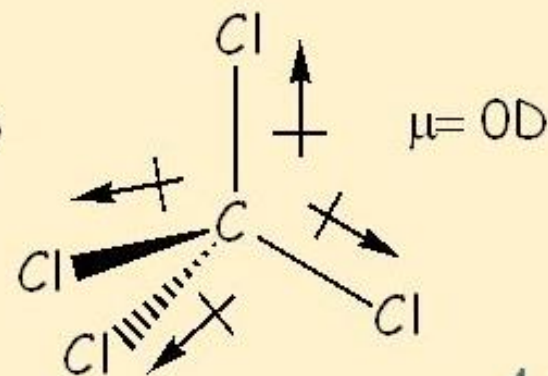
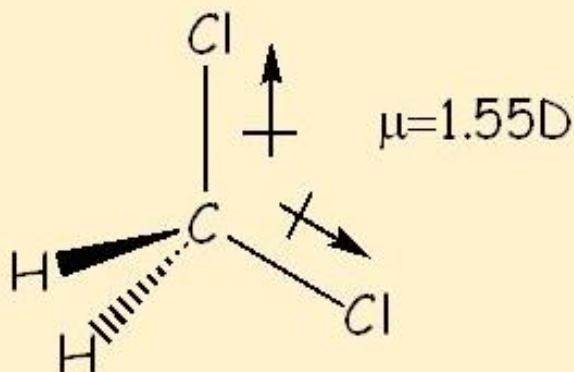
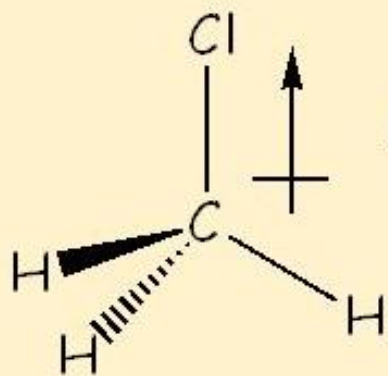
Momentos Dipolares de enlaces			
Enlace	Momento Dipolar, D	Enlace	Momento Dipolar, D
H-F	1.7	C-F	1.4
H-Cl	1.1	C-O	0.7
H-Br	0.8	C-N	0.4
H-I	0.4	C=O	2.4
H-C	0.3	C=N	1.4
H-N	1.3	C≡N	3.6
H-O	1.5		

La dirección del momento dipolar es hacia el átomo más electronegativo.

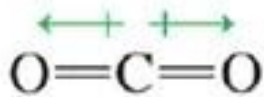
Polaridad de las moléculas



Momento dipolar molecular = composición de los momentos dipolares individuales

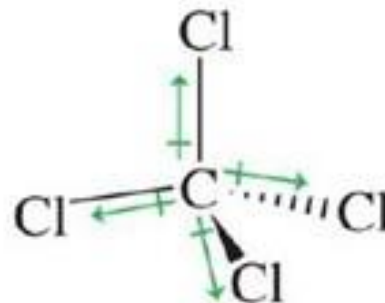


Polaridad de las moléculas



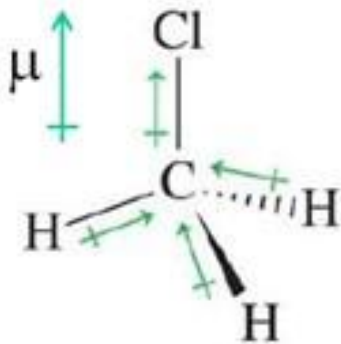
$$\mu = 0 \text{ D}$$

Dióxido de carbono



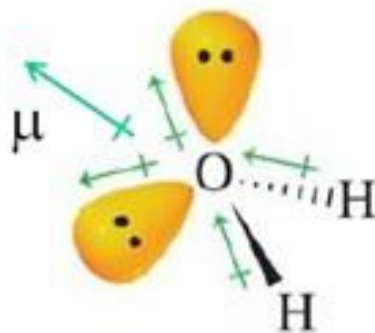
$$\mu = 0 \text{ D}$$

Tetracloruro de carbono



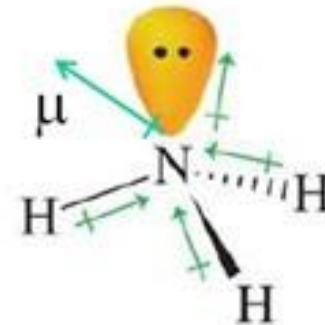
$$\mu = 1.87 \text{ D}$$

Clorometano



$$\mu = 1.85 \text{ D}$$

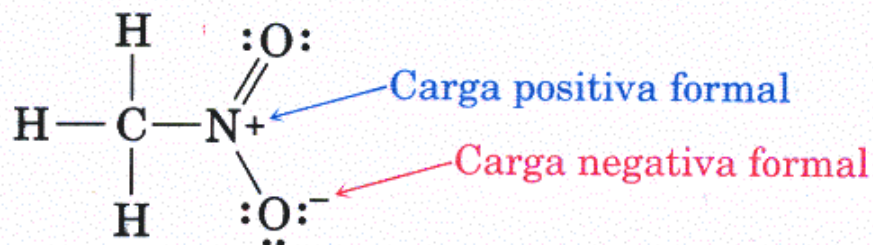
Agua



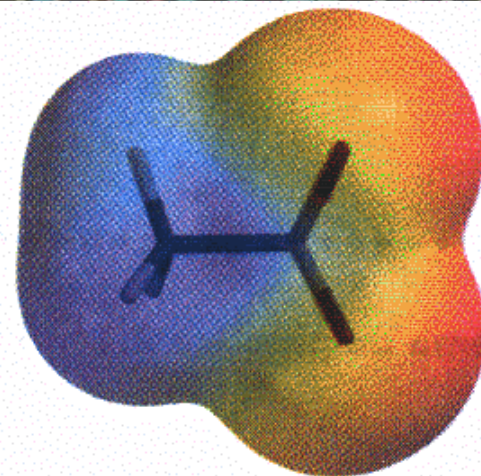
$$\mu = 1.47 \text{ D}$$

Amoniaco

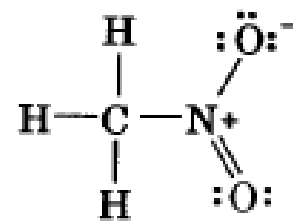
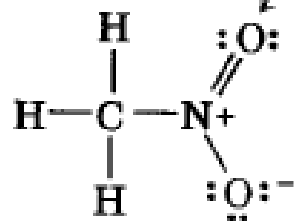
Resonancia



Nitrometano



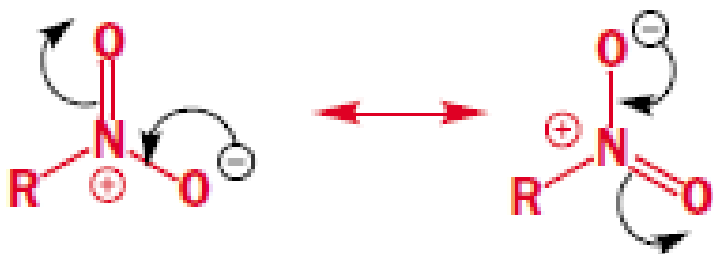
¿Enlace doble con este oxígeno?



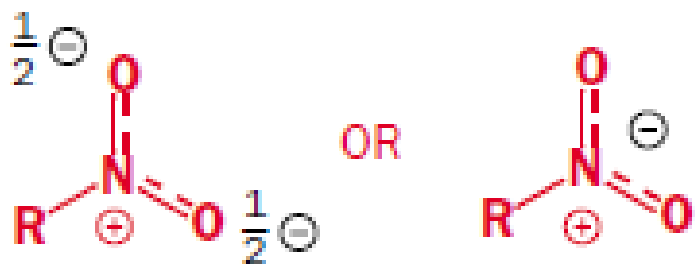
Nitrometano

¿O con éste?

Resonancia



Longitud de enlace N-O: 130 pm
Longitud de enlace N=O: 116 pm



La longitud real de cada enlace N-O
es 122 pm.
SON EQUIVALENTES

PSEUDODOBLES ENLACES



Resonancia

- ✓ Regla 1: Las formas resonantes son estructuras **imaginarias**, no son reales.
- ✓ Regla 2: Las formas de resonancia sólo difieren en la distribución de **electrones π y/o pares no enlazados**.
- ✓ Regla 3: Las formas de resonancia pueden ser **no equivalentes**.
- ✓ Regla 4: Las formas de resonancia deben tener **estructuras de Lewis válidas** y obedecer las reglas de valencia.
- ✓ Regla 5: El **híbrido** de resonancia siempre es **más estable** que cualquiera de las formas resonantes individuales.



Muchas gracias