

TEMA 1: estructuras y enlaces de los compuestos orgánicos.

Átomos más importantes.

Los principales átomos de la química orgánica son C, H, O, N, S, Cl, Br y I. Otros como el Li, Mg, B y P son importantes en procesos de síntesis.

Los átomos se combinan entre sí compartiendo **electrones de valencia** para alcanzar la configuración de **gas noble**. Algunos como **O** y **N** pueden donar e^- para formar un enlace coordinado o **dativo**.

Teoría de orbitales moleculares.

Según Schrödinger-Heisenberg y Dirac (1920) en los átomos se distingue un núcleo y una corteza, en la que se encuentran los e^- dispuestos en **capas** con una determinada **energía cuantizada**. Existen unas **zonas** concretas con una **probabilidad del 95%** de encontrar un e^- , estos son los **orbitales atómicos**, que tienen formas determinadas (s,p,d,f). Los orbitales atómicos más importantes son los s y los p.

Los orbitales con **energía** se llenan **primero**, y en cada uno de ellos se colocan **2 e^-** con spin contrario. En orbitales **p** se coloca **1 e^-** en cada uno de los 3 orbitales y **luego** se colocan los **restantes**.

Hibridación y orbitales híbridos.

En las moléculas los enlaces se dan por el **solapamiento** de orbitales atómicos, formando **orbitales moleculares**. Estos pueden ser **enlazantes** (menor energía) o **antienlazantes** (mayor energía, no favorecidos).

Pueden haber enlaces **entre** orbitales **s y p**, y solapamientos de orbitales **p**, que puede darse a lo largo del eje (enlace **sigma** y fuerte), o perpendicular al eje (enlace **pi** + débil).

En el CH_4 se funde un orbital s con 3 p, dando lugar a 4 orbitales híbridos **sp^3** proyectados hacia los 4 vértices de un tetraedro con un ángulo de enlace de $109,5^\circ$. En el eteno se funde un s con 2 p (orbital **sp^2** con ángulo de enlace de 120°) quedando un orbital p perpendicular a los híbridos. En la molécula de etino se fusiona un s y un p formando un orbital **sp** (180°) y quedan 2 orbitales p.

Concepto de grupo funcional.

Las moléculas orgánicas se componen de un esqueleto carbonado con una serie de grupos funcionales, como **dobles y triples enlaces**, o **heteroátomos** unidos de distinta manera. La **reactividad** depende principalmente de ellos.

Efectos polares en compuestos orgánicos.

Un átomo puede tener una tendencia a **donar e^-** (pot. de ionización) o a **aceptarlos** (afinidad electrónica).

La distinta **electronegatividad** entre los átomos que componen un enlace covalente provoca que los e^- se **acerquen** más a uno que al otro; entonces el enlace está **polarizado**.

Aunque haya enlaces polarizados no tiene que haber dipolos ya que las polarizaciones se **contrarrestan** entre sí.

El momento dipolar se llama $\mu = q \cdot d$ y si la suma de estos en la molécula es 0 la molécula no es un dipolo. La molécula de agua tiene un μ de 1,8 debye.

Carga formal.

Es una aproximación a la distribución de la carga de la molécula, suponiendo que los enlaces son covalentes puros.

$$CF = [n^{\circ} \text{ de e- de valencia}] - [n^{\circ} \text{ de e- de no enlace} + n^{\circ} \text{ de e- de enlace}].$$

Estructuras resonantes.

Algunas veces una misma estructura de Lewis no puede representar la molécula; en ese caso hay que recurrir a varias estructuras, siendo la molécula real un **promedio** de ellas.

Para que una estructura sea resonante:

- 1- El desplazamiento de un par electrónico conlleva un movimiento de carga.
- 2- Las posiciones relativas de los átomos permanecen inalteradas.
- 3- Las flechas relacionan estructuras resonantes.
- 4- Solo se mueven los e- solitarios y los de enlaces π .

Para representar estructuras resonantes:

- 1- Las estructuras con + n° de octetos tienen preferencia.
- 2- Las cargas se colocan preferentemente en los átomos con electronegatividad compatible con estas.
- 3- Las estructuras con menor separación de cargas tienen preferencia.
- 4- La regla del octeto puede imponer la separación de cargas.