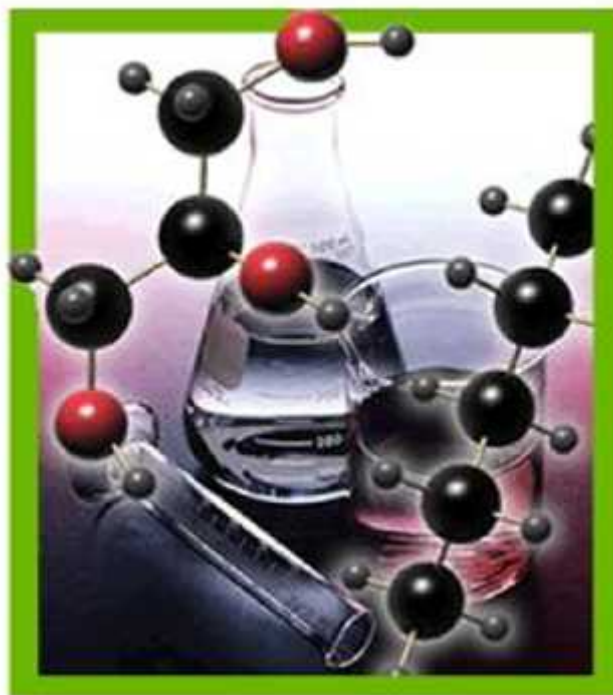


Estructura y propiedades de los compuestos orgánicos

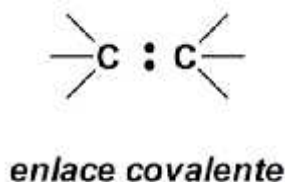


didactalia.net

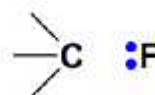


Polaridad

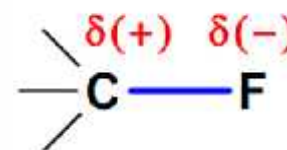
En la mayoría de los compuestos orgánicos el átomo de carbono se enlaza a átomos más electronegativos, lo que promueve que los electrones del enlace covalente sean atraídos con mayor intensidad hacia el átomo más electronegativo



enlace covalente



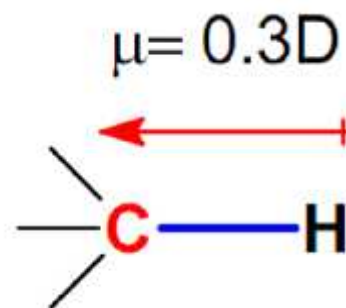
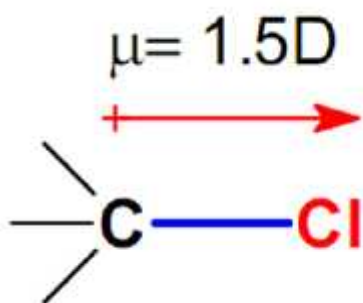
*enlace covalente
polar*



Esta situación conduce a la polarización del enlace covalente, al estar el par de electrones más próximo al átomo electronegativo éste sustentará una densidad de carga negativa ($\delta(-)$) (hablamos de densidad de carga ya que la situación no es la de un ión), mientras que el otro átomo del enlace adopta una densidad de carga positiva ($\delta(+)$). Estas densidades se representan con la letra d. La polarización de ese enlace se mide mediante su momento dipolar (μ).

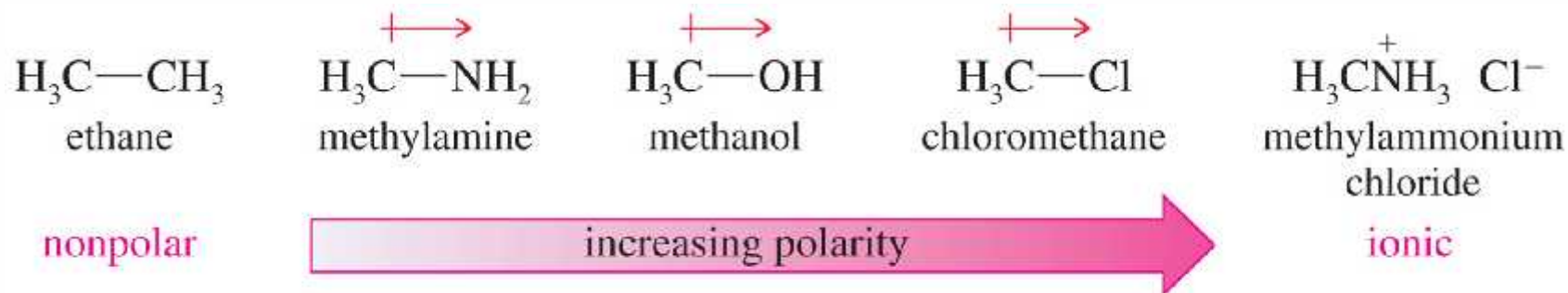
MOMENTO DIPOLAR DE ENLACE. La polaridad de un enlace se mide con el momento dipolar de enlace, μ .

Este descriptor fisicoquímico es un vector cuya dirección es la del enlace covalente en estudio, su sentido es hacia el átomo electronegativo y el módulo resulta, simplificado, del producto escalar entre la carga en el átomo (la carga positiva o la negativa) y la distancia entre las cargas



La unidad del momento dipolar es el Debye (D)

Momentos Dipolares



Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

- **El Momento Dipolar (μ)** es producido por la diferencia de electronegatividad.
- **El Momento Dipolar (μ)** depende de la cantidad de carga y de la separación de ellas.

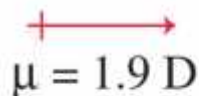
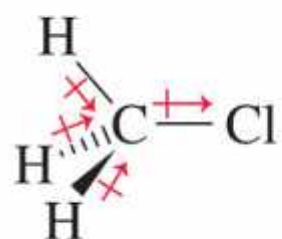
Momentos dipolares de enlace (μ)

Momentos dipolares (Debye) para algunos enlaces covalentes

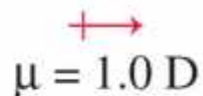
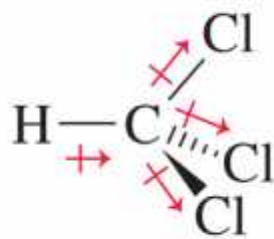
Bond	Dipole Moment, μ	Bond	Dipole Moment, μ
$\overset{+}{\text{C}}\text{---}\overset{\rightarrow}{\text{N}}$	0.22 D	$\overset{+}{\text{H}}\text{---}\overset{\rightarrow}{\text{C}}$	0.3 D
$\overset{+}{\text{C}}\text{---}\overset{\rightarrow}{\text{O}}$	0.86 D	$\overset{+}{\text{H}}\text{---}\overset{\rightarrow}{\text{N}}$	1.31 D
$\overset{+}{\text{C}}\text{---}\overset{\rightarrow}{\text{F}}$	1.51 D	$\overset{+}{\text{H}}\text{---}\overset{\rightarrow}{\text{O}}$	1.53 D
$\overset{+}{\text{C}}\text{---}\overset{\rightarrow}{\text{Cl}}$	1.56 D	$\overset{+}{\text{C}}\text{=}\overset{\rightarrow}{\text{O}}$	2.4 D
$\overset{+}{\text{C}}\text{---}\overset{\rightarrow}{\text{Br}}$	1.48 D	$\overset{+}{\text{C}}\text{\equiv}\overset{\rightarrow}{\text{N}}$	3.6 D
$\overset{+}{\text{C}}\text{---}\overset{\rightarrow}{\text{I}}$	1.29 D		

Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

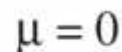
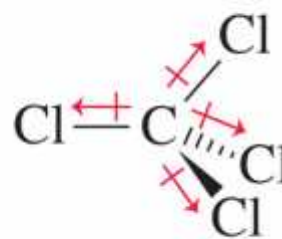
Momentos dipolares de moléculas



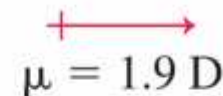
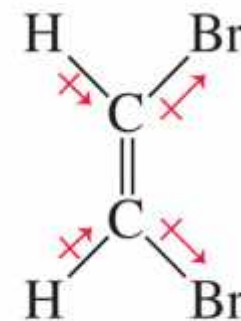
chloromethane



chloroform



carbon tetrachloride



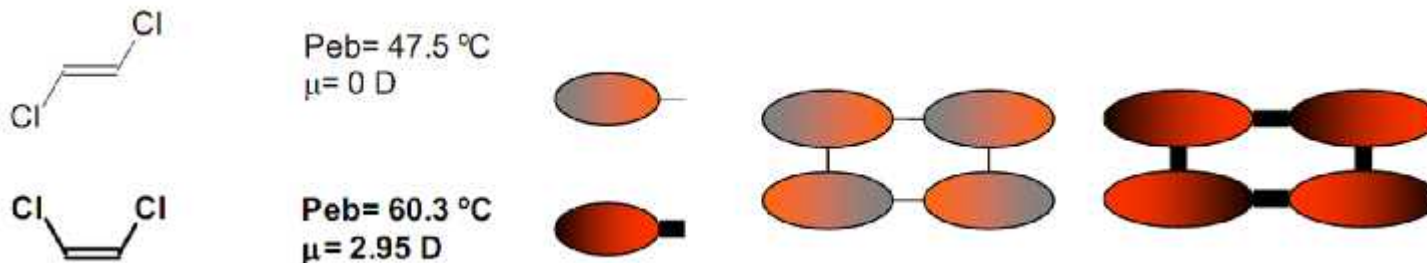
cis-1,2-dibromoethene

Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

- El Momento dipolar molecular es la suma vectorial de los momentos dipolares de enlace.
- Depende de la polaridad de enlaces y de la geometría de la molécula.
- Pares de electrones no compartidos contribuyen al momento dipolar molecular.

El momento dipolar molecular es un indicador de la polaridad general de una molécula. El momento dipolar molecular (también el de enlace) afectará a las propiedades químicas y físicas de una molécula. Así por ejemplo, el momento dipolar molecular puede ser uno de los responsables de las interacciones intermoleculares de los compuestos orgánicos en estado líquido. Por lo que, si para moléculas de un compuesto, A, estas interacciones son más fuerte que para moléculas de un compuesto, B, el punto de ebullición de A será superior al punto de ebullición de B.

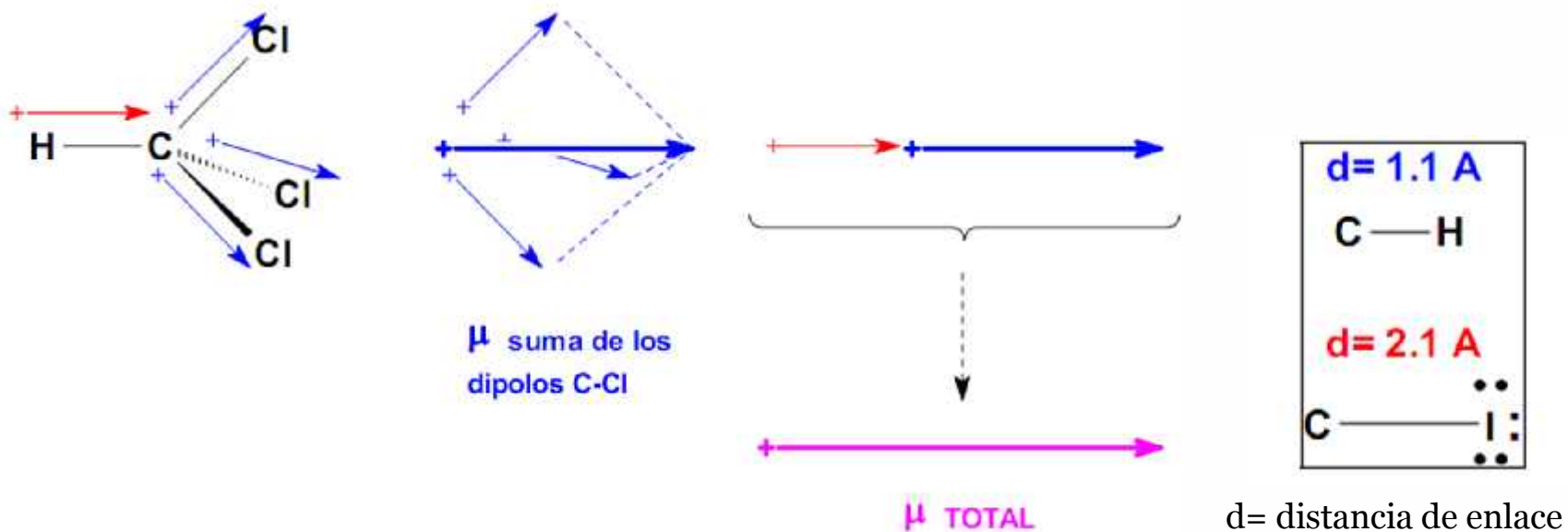
MAYOR DIPOLO MOLECULAR => MAYOR PUNTO DE EBULLICIÓN



Nota: negro / gris: densidad negativa, rojo / naranja: densidad positiva
Líneas finas: enlace intermolecular débil; líneas gruesas: enlace fuerte

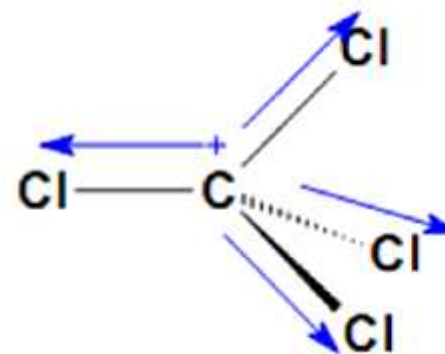
Ejemplo

Dado que la diferencia de electronegatividad C-Yodo es menor que la diferencia C-Hidrógeno ¿Cuáles pueden ser los motivos que explican que el momento dipolar del enlace C-Yodo es mucho mayor que el momento dipolar de enlace C-Hidrógeno?



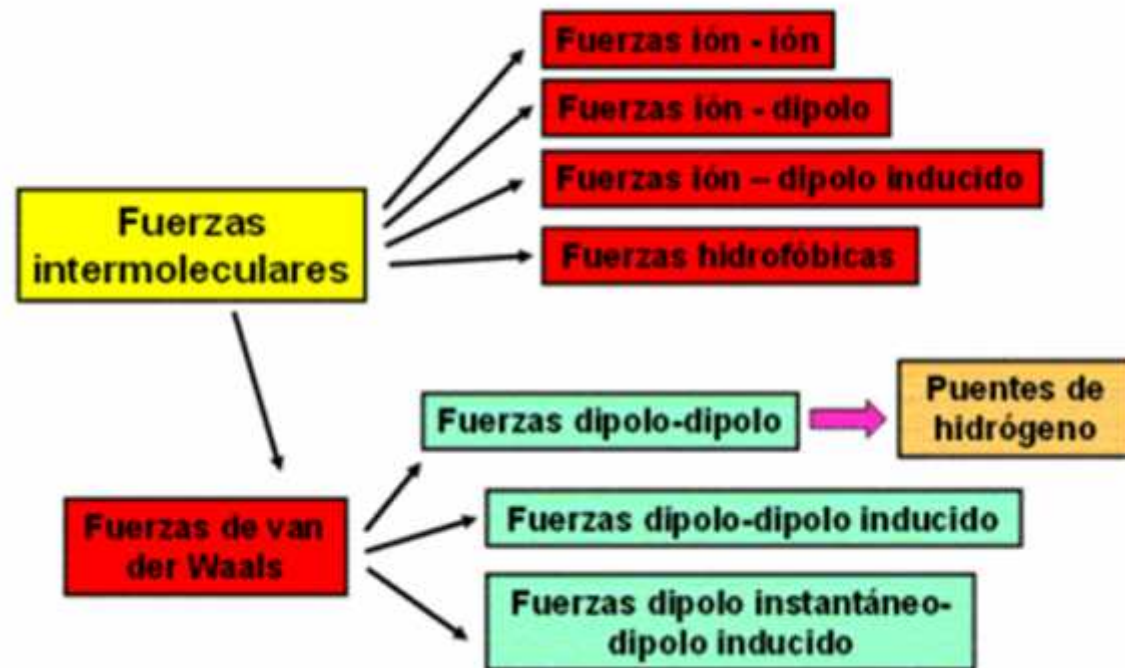
Sin embargo, la sola existencia, en una molécula, de un momento dipolar de enlace no garantiza que la misma posea momento dipolar molecular.

Por ejemplo, el tetracloruro de carbono (CCl_4) posee un μ igual a cero, ya que los momentos dipolares de enlace al sumarse, vectorialmente, se anulan.



Fuerzas Intermoleculares

Las fuerzas de atracción entre moléculas determinan las propiedades físicas de las sustancias: punto de fusión (mp), punto de ebullición (bp) y solubilidad.



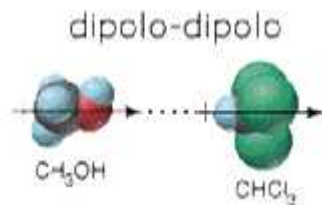
girlsontherun.jimdo.com

<http://www.youtube.com/watch?v=-yLlhOmky4>

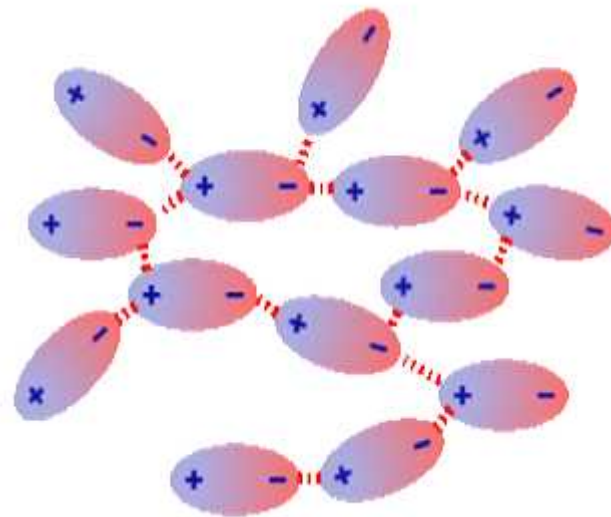
<http://www.youtube.com/watch?v=oCqPwcNGIqA>

Dipolo–Dipolo

- **Interacciones Dipolo–dipolo** ocurren entre dos moléculas polares.
- En el estado líquido o sólido, las moléculas se orientan de tal manera que el extremo positivo de una coincide con la parte negativa de la otra.

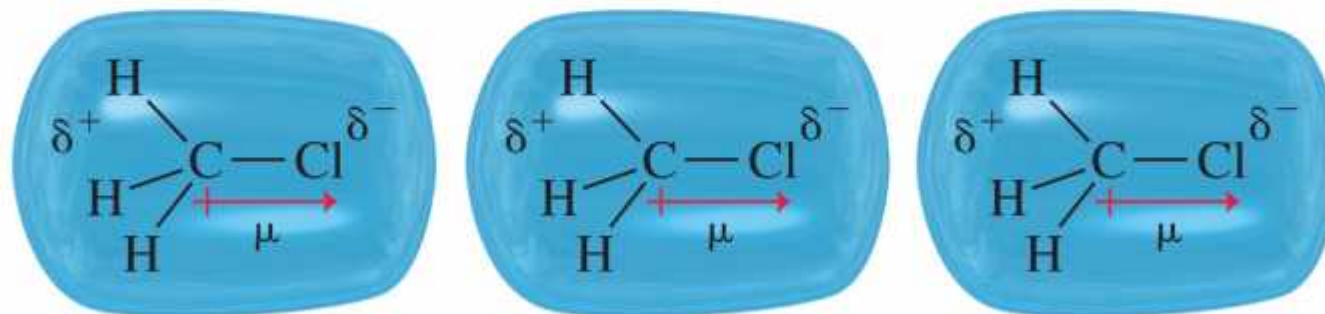


corinto.pucp.edu.pe

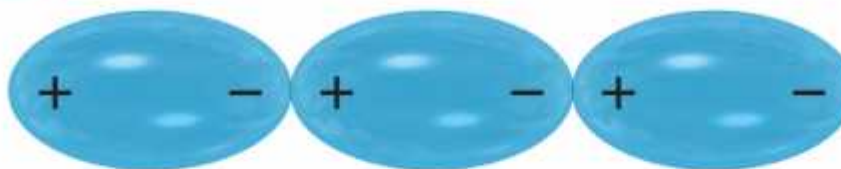


iesdolmendesoto.org

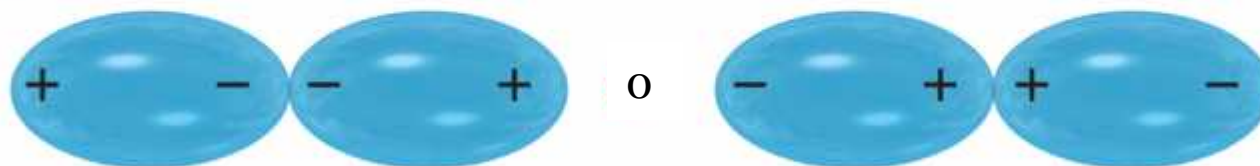
Atracción (muy común)



Simbolizado como:

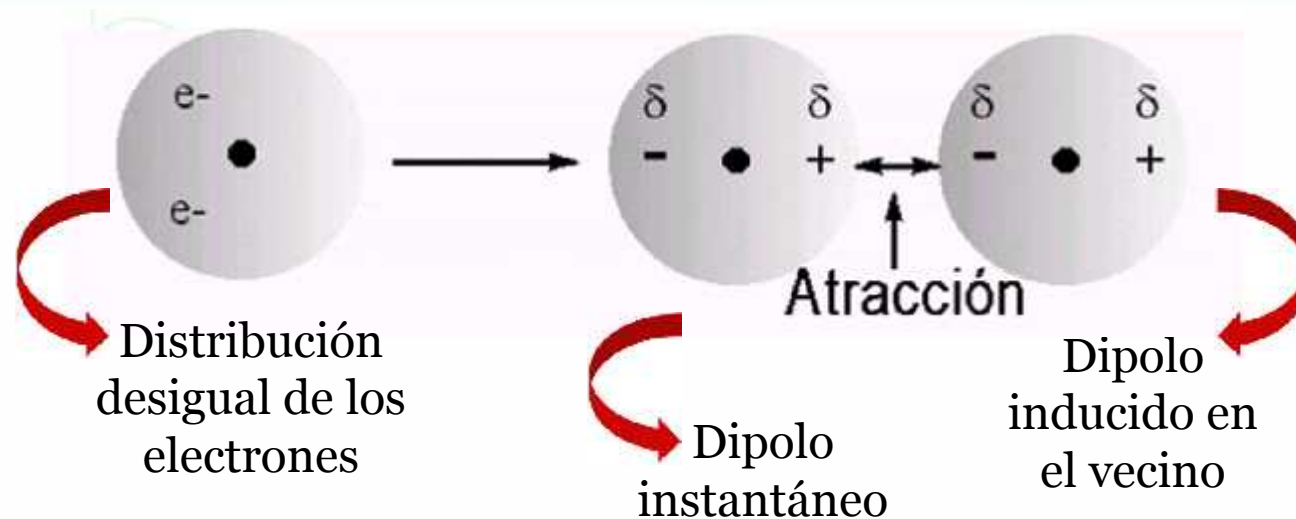


Repulsión (poco común)



Fuerzas de Dispersión de London

- La formación de un momento dipolar temporal en una molécula puede inducir la formación de otro momento dipolar temporal en una molécula cercana.
- La fuerza de atracción dipolo-dipolo ocurre en una fracción de tiempo.
- Esta es la principal fuerza de atracción entre moléculas no polares.
- Moléculas de mayor tamaño son más polarizables.
- Ramificación baja los puntos de ebullición porque disminuye superficie de contacto entre las moléculas.



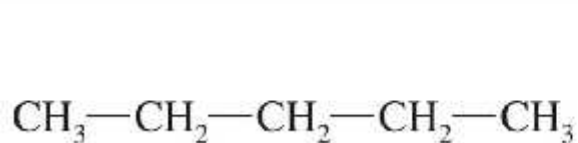
Puntos de ebullición

El punto de ebullición de un compuesto es la temperatura a la cual el compuesto líquido se convierte en gas. Para que un compuesto se vaporice, las fuerzas que mantienen las moléculas unidas unas a otras deben romperse.

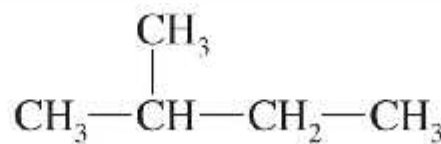
Esto significa que el punto de ebullición de un compuesto depende de la atracción entre las moléculas, de manera que si las moléculas se mantienen unidas por interacciones fuertes, se necesitará mucha energía para separar las moléculas unas de otras y el compuesto tendrá el punto de ebullición muy alto.

Por otra parte, si las fuerzas intermoleculares son débiles, se necesitará una cantidad de energía relativamente baja para separar las moléculas unas de otras, y el compuesto tendrá el punto de ebullición bajo.

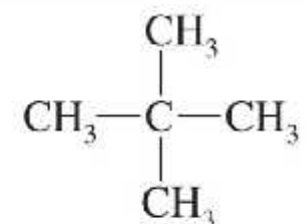
Efecto de la ramificación en la molécula sobre los puntos de ebullición



n-pentano, punto ebullición = 36 °C



isopentano, punto ebullición = 28°C

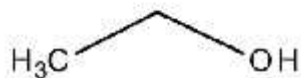


neopentano, punto ebullición = 10 °C

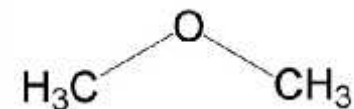


Disminuye superficie de contacto

Otros ejemplos



ethanol, punto ebullición = 78°C

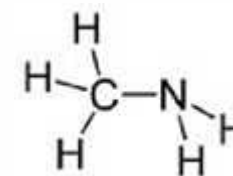
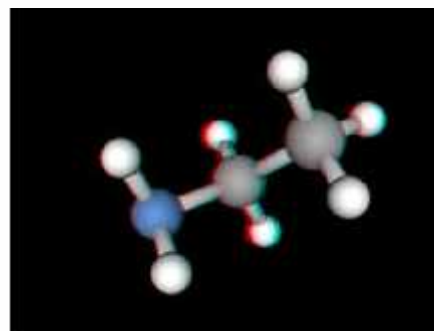


dimetiléter, punto ebullición = -25°C

Los puentes de Hidrógeno aumentan el punto de ebullición



ethanol, punto ebullición = 78°C



etilamina, punto ebullición = 17°C

O—H es más polar N—H

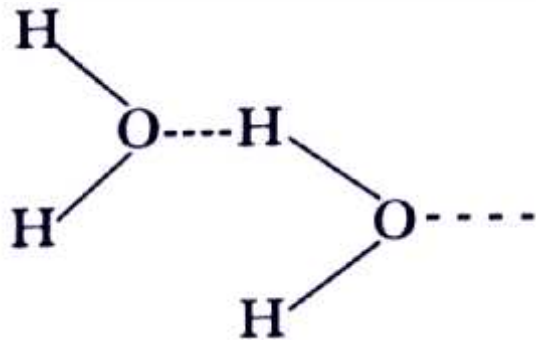
Puntos de fusión

Es la temperatura a la que un sólido se convierte en líquido. El factor determinante del punto de fusión es el empaquetamiento de las moléculas en la red cristalina: cuanto mejor se ajusten al cristal mayor será la energía necesaria para romper la red y, por tanto, mayor será el punto de fusión.



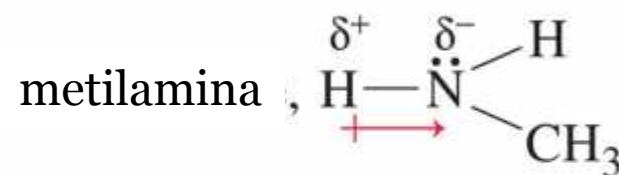
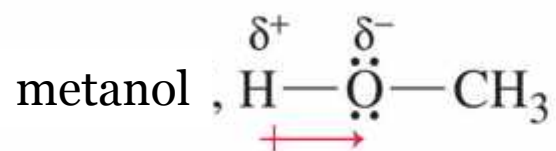
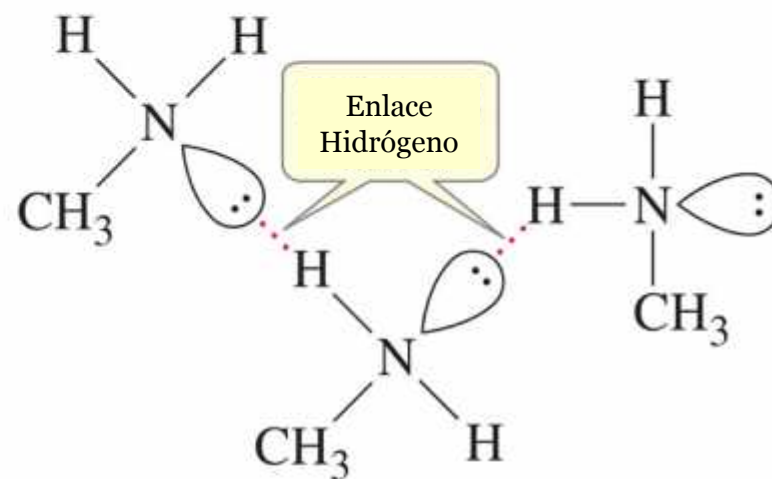
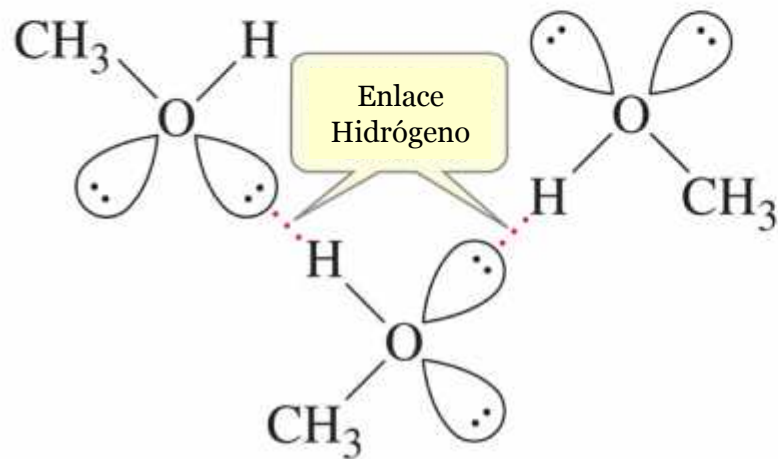
Puentes de Hidrógeno

- Fuerte interacción dipolo-dipolo.
- Las moléculas deben tener enlaces N-H o O-H
- El H de una molécula interacciona con el par de electrones no enlazante de la otra molécula.
- El O—H es más polar que N—H, por lo tanto los alcoholes tienen puentes de H más fuertes.



es.wikipedia.org

<http://www.youtube.com/watch?v=C76wGduAQP8>



Solubilidad

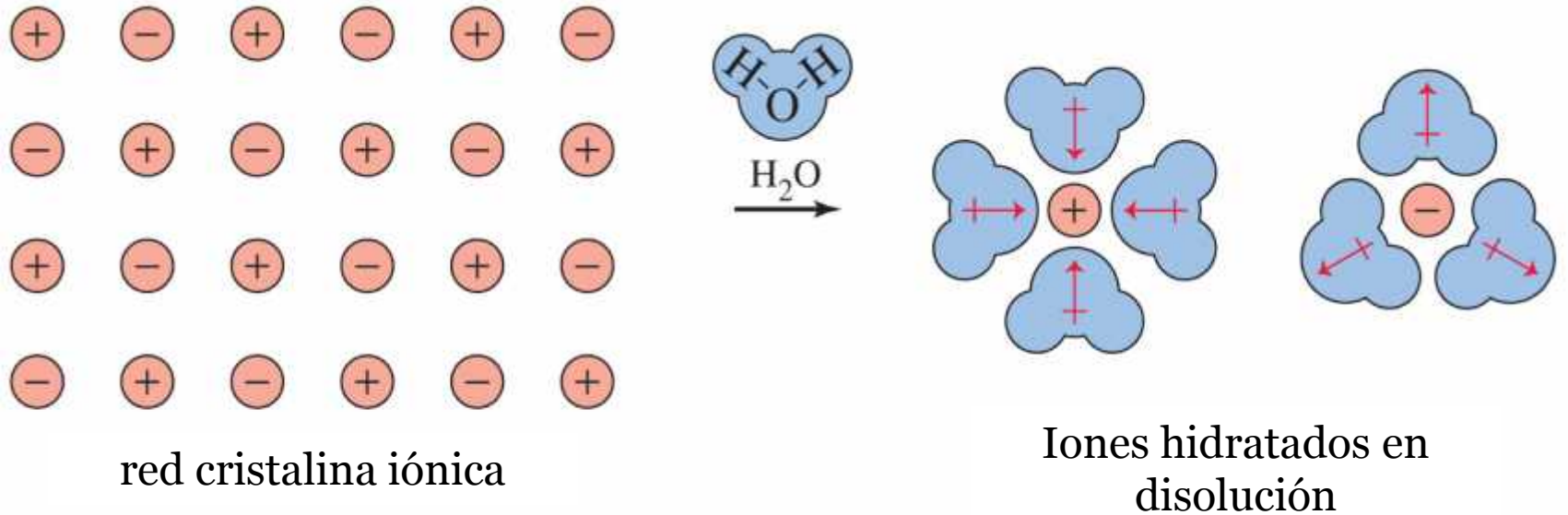
- Lo similar disuelve lo similar.
- Los solutos polares se disuelven en solventes polares.
- Los solutos no polares se disuelven en solventes no polares.



grupon4quimicaorganica.blogspot.com

<http://www.youtube.com/watch?v=TdFord6bIao>

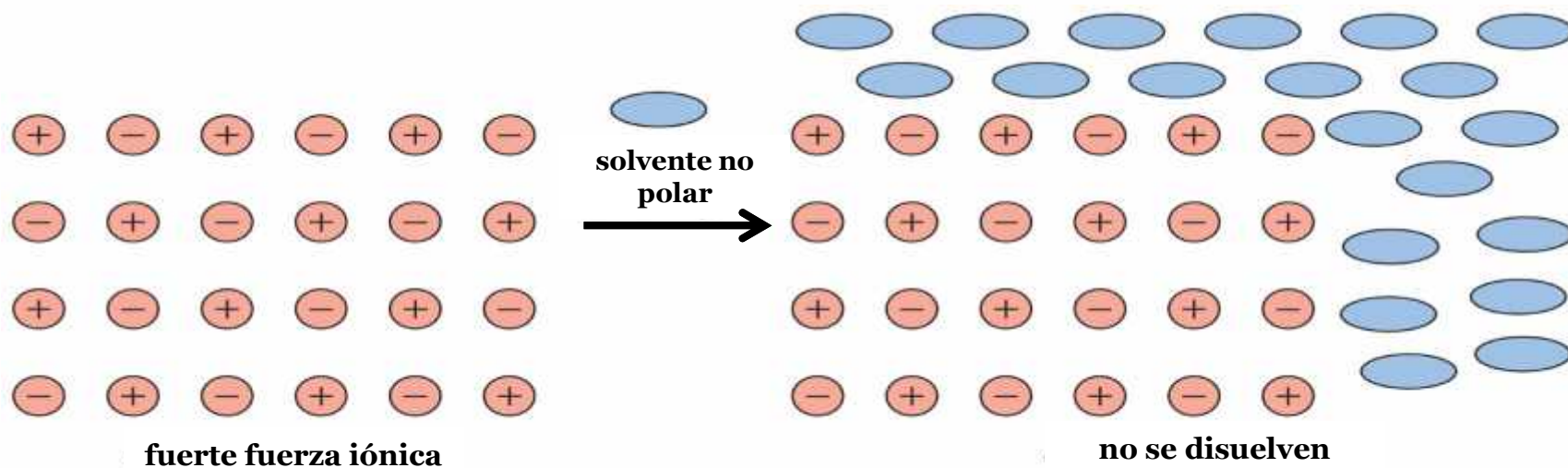
Soluto polar en un solvente polar



Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

La hidratación libera energía y aumenta entropía

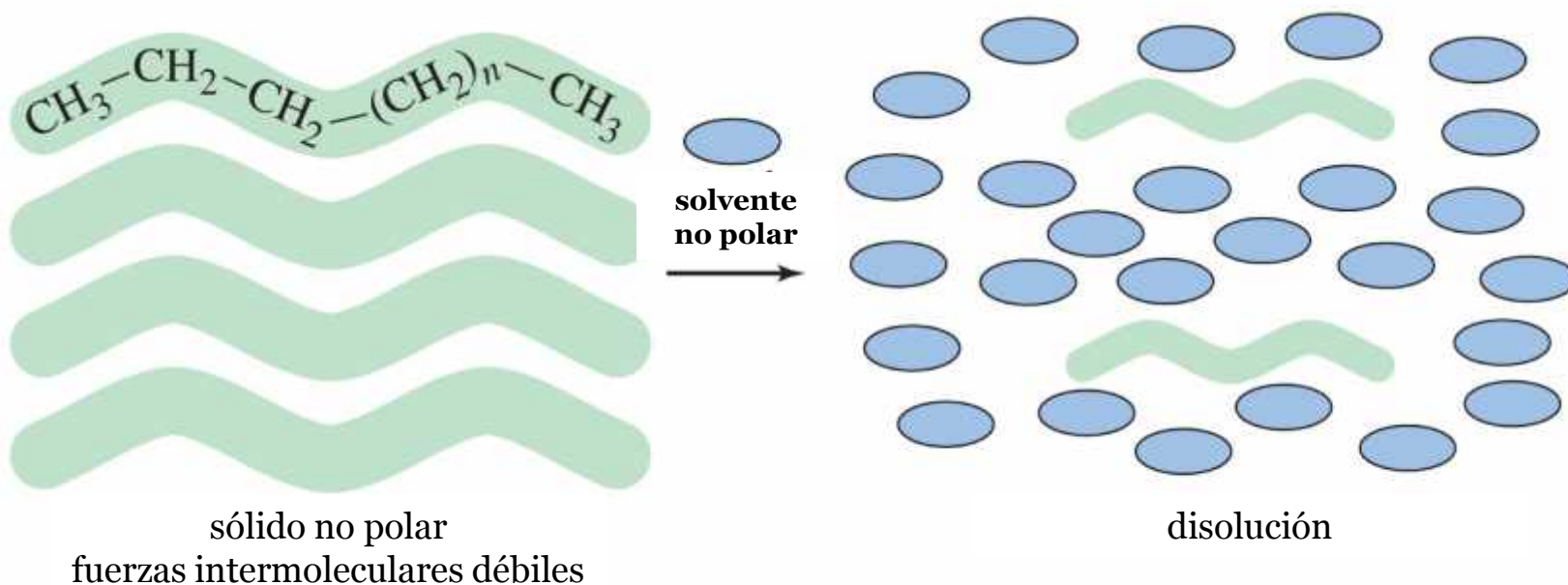
Soluto polar en un solvente no polar



Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

El solvente no puede romper romper las fuerzas intermoleculares del soluto, por lo tanto el soluto no se disolverá.

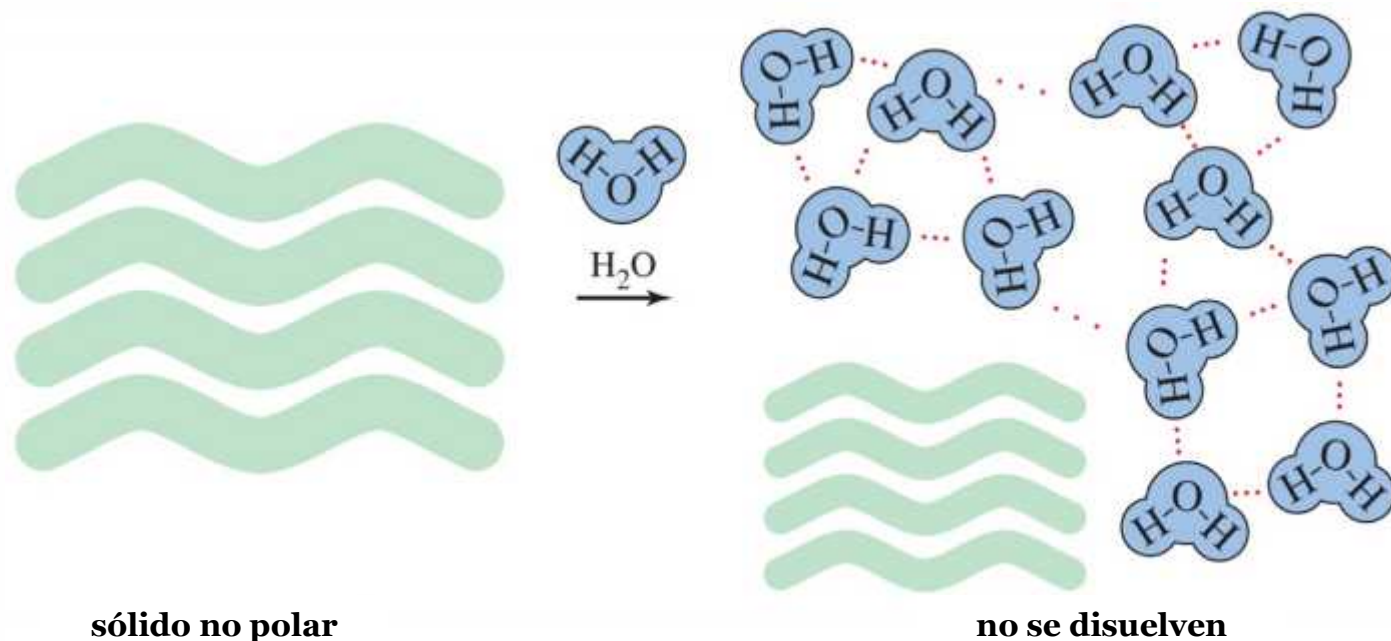
Soluto no polar en un solvente no polar



Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

Las débiles fuerzas intermoleculares de una sustancia no polar son superadas por las débiles atracciones de un solvente no polar. La sustancia no polar se disuelve.

Soluto no polar en un solvente polar




Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

Si una molécula no polar fuese disuelta en agua, se deberían romper los Puentes de H del agua. Las sustancias no polares no se disuelven en agua.

Acidez en las moléculas orgánicas

La constante de acidez es una medida de la fuerza del ácido, de manera que cuanto mayor sea su valor más fuerte será el ácido (mayor facilidad para donar el protón). La acidez también se puede expresar como pK_a , que se define como:


$$pK_a = -\log K_a$$

Cuanto menor sea el pK_a mayor será la acidez del compuesto. Hay que tener presente que la acidez y basicidad son conceptos termodinámicos: no importa la velocidad a la que se alcance el equilibrio sino la posición de éste. Un ácido fuerte es el que tiene una elevada K , lo que significa que el equilibrio está muy desplazado a la derecha, lo que a su vez implica una gran estabilización termodinámica de la base conjugada en relación con el ácido que la genera.

Determinados compuestos orgánicos poseen características ácidas. Los más importantes son:

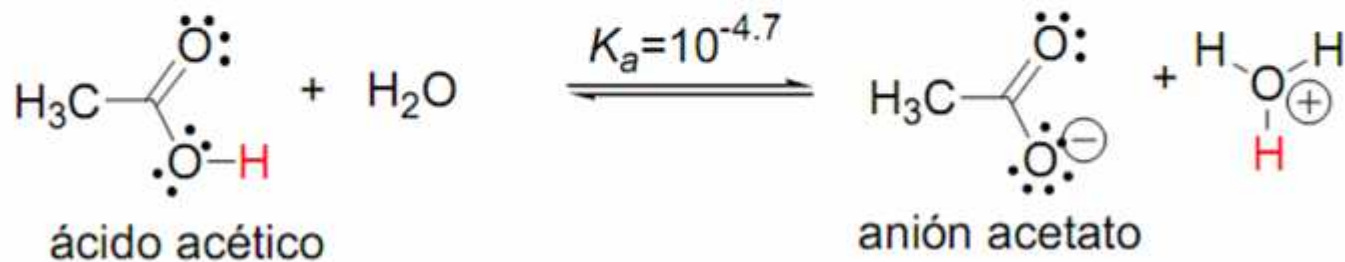
Los *ácidos carboxílicos* ($RCOOH$) con pK_a del orden de 3 a 5. Estos compuestos son, al igual que el agua, anfotéricos y por tanto capaces de actuar como ácidos o como bases.

Los *alcoholes*, mucho menos ácidos que los *ácidos carboxílicos*, con valores de pK_a alrededor de 16. Son también anfóteros.

Las *sales de amonio*, *ácidos conjugados de las aminas*, con valores de pK_a entre 5-10. Son más ácidos que los alcoholes.

Especies	Valores pK _a
Ácidos carboxílicos	Alrededor de 5
Aminas protonadas	Alrededor de 10
Alcoholes	Alrededor de 15

La disociación de un ácido carboxílico en agua conlleva la cesión de un protón al disolvente y la formación de un anión carboxilato. Normalmente, los valores de la constante de acidez de los ácidos carboxílicos simples son de alrededor de 10^{-5} ($pK_a=5$). Por ejemplo, la constante de acidez del ácido acético (CH_3COOH) es de $10^{-4.7}$ ($pK_a=4.7$).



Efecto inductivo y fuerza ácida

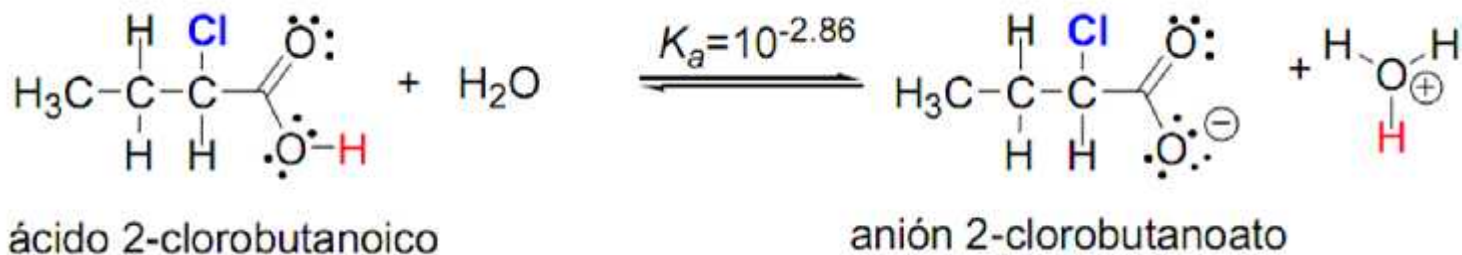
Cuando un ácido carboxílico se disocia se genera un anión carboxilato, de manera que cuanto más estable sea el anión carboxilato más desplazado hacia la derecha estará el equilibrio y más ácido será el ácido carboxílico:



Si un ácido carboxílico contiene en su estructura átomos electronegativos su acidez aumenta porque el efecto inductivo electrón-atrayente de esta clase de átomos contribuye a deslocalizar la carga negativa del anión carboxilato. Este efecto inductivo puede ser muy grande si están presentes uno o más grupos electrón-atrayentes en el átomo del carbono α

La magnitud del efecto de un sustituyente depende de su distancia al grupo carboxilo. Los sustituyentes electrón-atrayentes en el carbono α son los más eficaces a la hora de aumentar la fuerza de un ácido. Los sustituyentes más alejados tienen efectos mucho más pequeños sobre la acidez, lo que pone de manifiesto que los efectos inductivos decrecen rápidamente con la distancia.

Aumento de la acidez con la proximidad al grupo carboxilo de los átomos electrón-atrayentes



Efectos estéricos y fuerza ácida

Los efectos estructurales que proceden de interacciones espaciales entre los grupos se denominan efectos estéricos. Los efectos estéricos también pueden jugar un papel importante en la acidez.

El impedimento estérico a la solvatación, causado por el tamaño del ácido o del disolvente, puede inhibir la estabilización de la base conjugada por parte del disolvente y, en consecuencia, disminuir la acidez.

Por ejemplo, el ácido benzoico es un ácido más fuerte que el ácido 2,6-di-*t*-butilbenzoico ya que en el primero el grupo ácido carboxílico (COOH) está rodeado tan sólo de un anillo aromático y las moléculas de agua pueden solvatar sin dificultad al anión benzoato.

