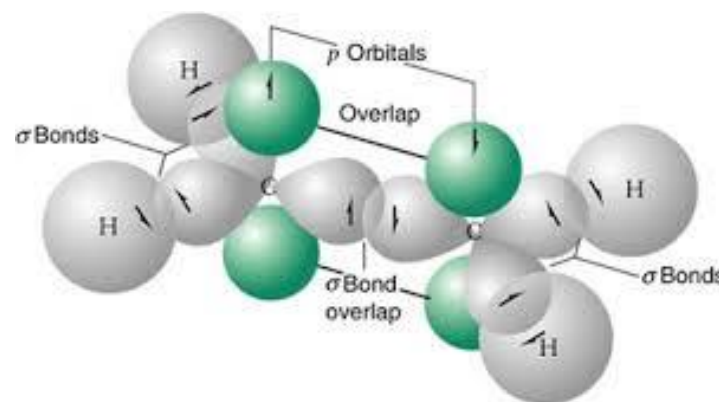
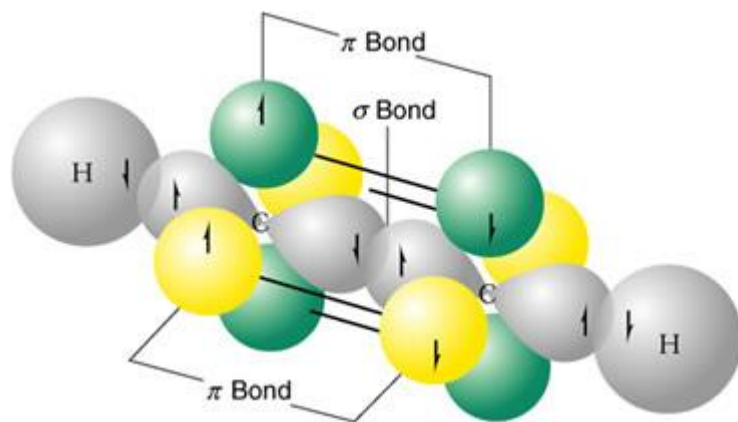
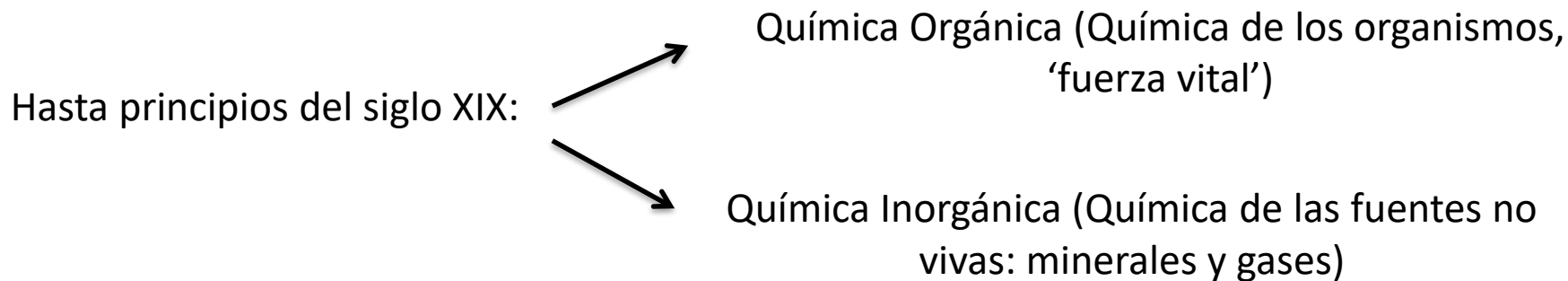
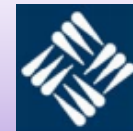


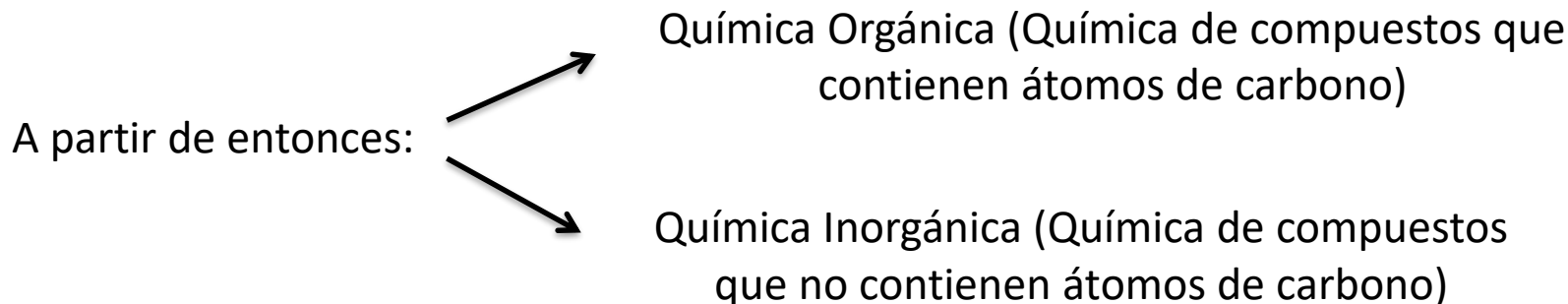
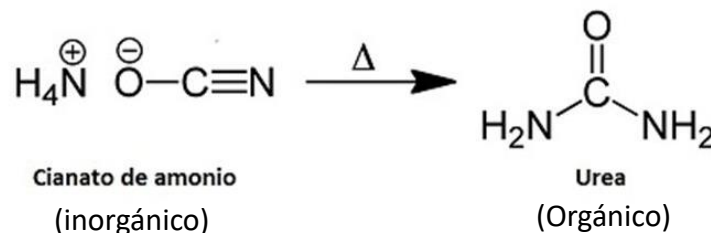
- 1.1 Introducción a la química Orgánica
- 1.2 Enlace y estructura de la Materia
- 1.3 Hibridación y tipos de enlace
- 1.4 Teoría de Orbitales Moleculares
- 1.5 Fuerzas Intermoleculares y propiedades físicas

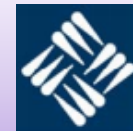


1.1 Introducción a la Química Orgánica

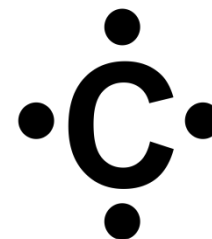


Por serendipia, Friedrich Wöhler en 1828 consigue obtener urea a partir de un compuesto no vivo





Química Orgánica = Química del Carbono



El carbono es sin duda el átomo más importante para el ser humano

Los alimentos (glúcidos, lípidos, proteínas)

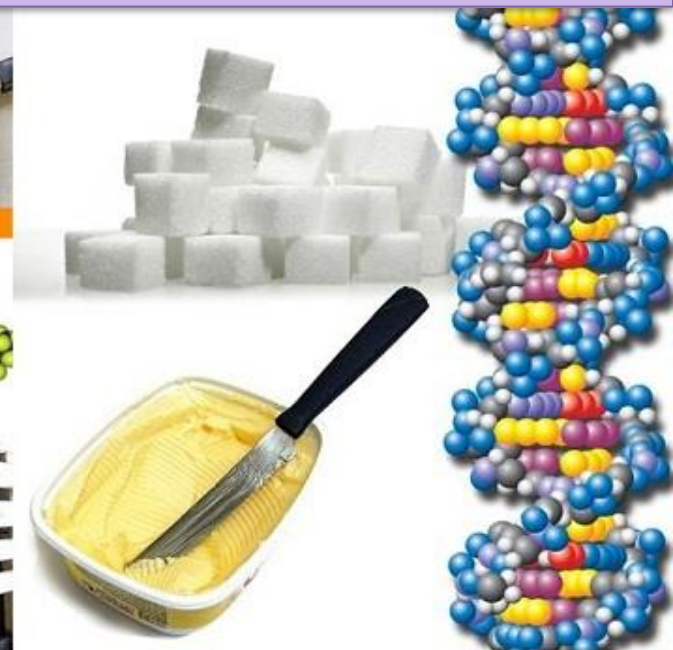
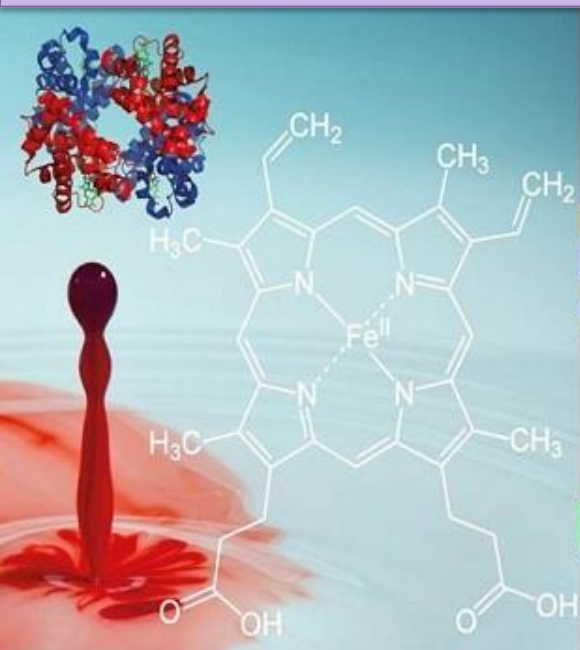
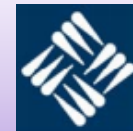
Nuestros sentidos (olfato, gusto, la vista)

Nuestro organismo (ADN, ARN, células)

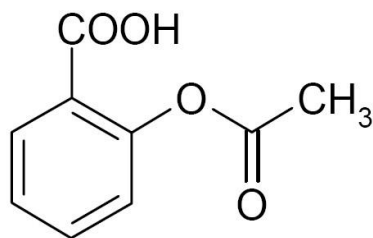
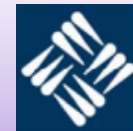
Industria (vestimenta, plaguicidas, pinturas, adhesivos, plásticos)

Productos Farmacéuticos: son moléculas orgánicas que en la mayoría de los casos interaccionan con 'receptores' del cuerpo humano que a su vez son compuestos orgánicos

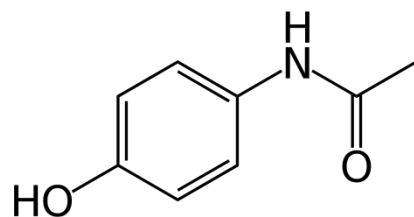
1.1 Introducción a la Química Orgánica



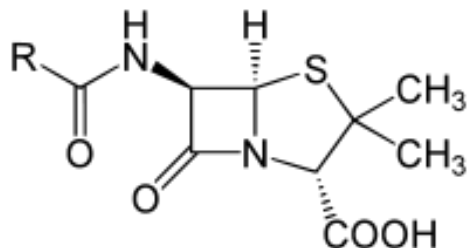
1.1 Introducción a la Química Orgánica



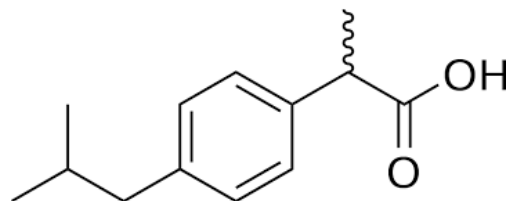
[Ácido acetil salicílico]
Ácido 2-(acetiloxi)-benzoico
(Aspirina)



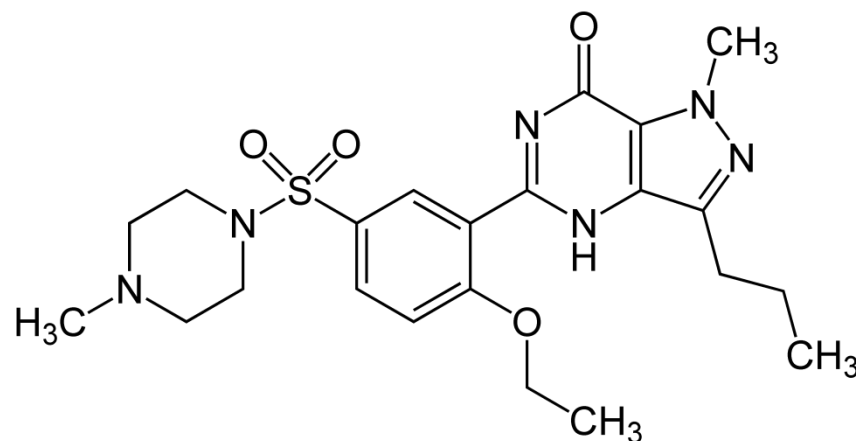
N-(4-hidroxifenil)acetamida
(Paracetamol)



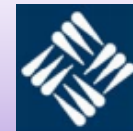
Familia de las penicilinas



Ácido (*RS*)-2-(4-isobutilfenil)propanoico
(Ibuprofeno)



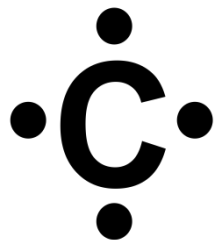
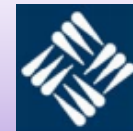
Citrato de 1-[4-etoxi-3-(6,7-dihidro-1-metil-7-oxo-3-propil-1*H*-pirazol[4,3-*d*]pirimidin-5-il)fenilsulfonil]-4-metilpiperazina (Viagra)



La Química orgánica es la herramienta que va a permitir al farmacéutico multitud de tareas relacionadas con los fármacos:

- Identificar compuestos
- Diseñar nuevas familias de fármacos
- Nombrar moléculas
- Generar nuevos fármacos dentro de una familia
- Identificar dianas terapéuticas
- Sintetizar nuevos compuestos
- Diseñar nuevas rutas sintéticas
- Entender los mecanismos de reacción

Es la rama de la química más importante para un farmacéutico



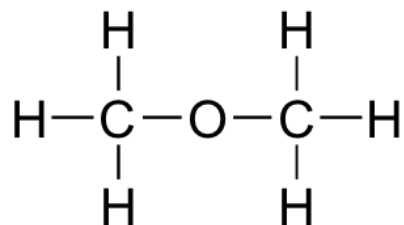
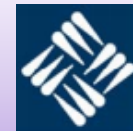
El Carbono va a ser nuestra pieza principal de estructura, aunque no será la única.

H, O, N, Halógenos y otros elementos en menor medida van a generar enlaces con el C y van a formar parte de los compuestos orgánicos.

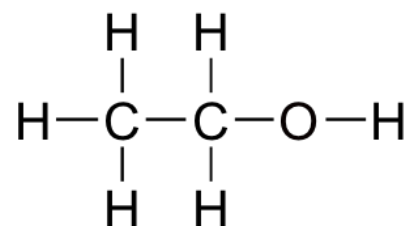
Tetravalente	Trivalente	Divalente	Monovalente
$\begin{array}{c} \\ - \text{C} - \\ \end{array}$	$\begin{array}{c} - \text{N} - \\ \end{array}$	$- \text{O} -$	$\text{H} - \quad \text{X} -$ X = F, Cl, Br, I
4 enlaces	3 enlaces	2 enlaces	1 enlace

La interacción entre los distintos átomos es lo que nos va a dar lugar a las diferentes moléculas

1.2 Enlace y estructura de la Materia



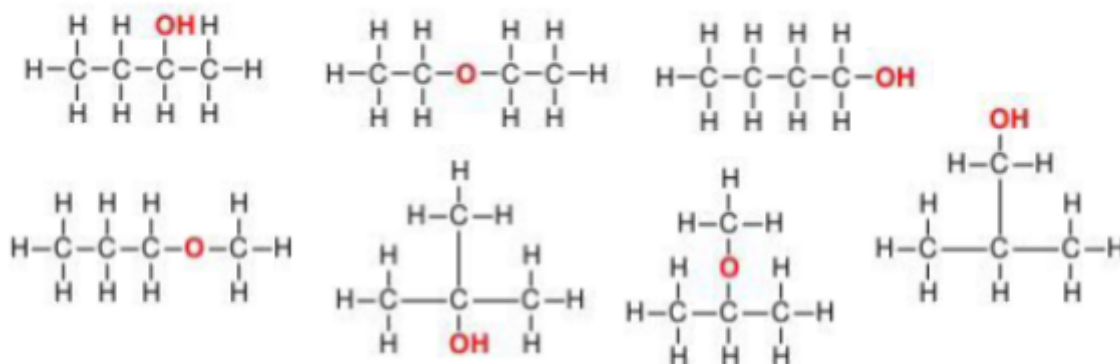
Dimetil éter ($\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$)



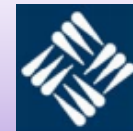
Etanol ($\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$)

Misma forma molecular ($\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$) y diferente estructura  **Isómeros estructurales**

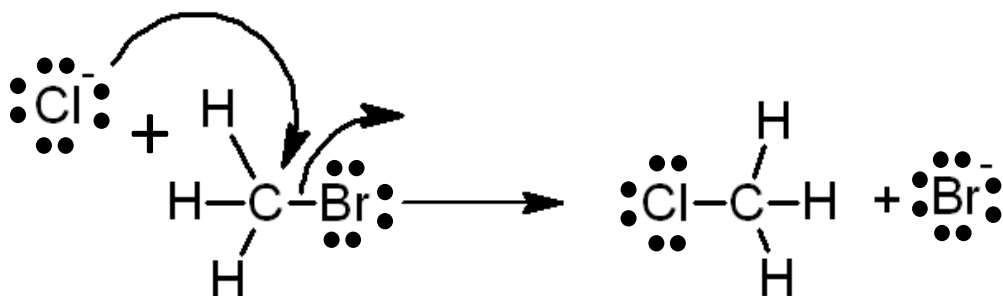
Cuanto mayor sea la molécula mayor número de isómeros estructurales, aunque pueden ser estables o inestables



Isómeros estructurales del
($\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$)



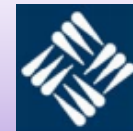
Aunque representamos los átomos, lo que realmente va a producir los enlaces son los electrones (e^-).



El movimiento de e^- es el responsable de las reacciones

Entender porqué los e^- reaccionan selectivamente con un sustrato determinado nos permite predecir la reactividad de las moléculas

1.2 Enlace y estructura de la Materia



El enlace del Carbono con otros átomos será la mayoría de las veces covalente

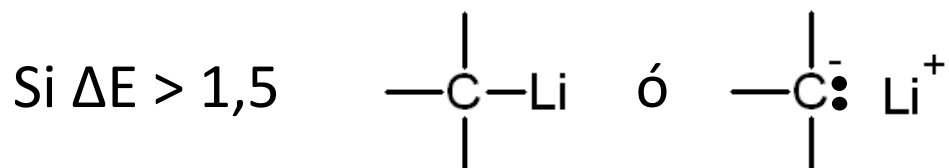
$\Delta E < 0,5$ enlace covalente

$0,5 < \Delta E < 2,0$ enlace covalente polar

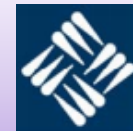
$\Delta E > 2,0$ enlace iónico

	1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A
1	H 2.1						
2	Li 1.0	Be 1.5	B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0
3	Na 0.9	Mg 1.2	Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0
			Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8
			In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5
			Tl 1.8	Pb 1.8	Bi 1.9	Po 2.0	At 2.2

Valores de electronegatividad



1.2 Enlace y estructura de la Materia



enlace covalente polar

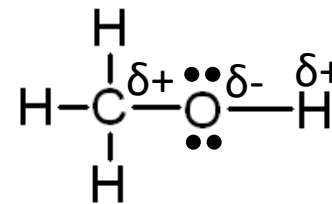
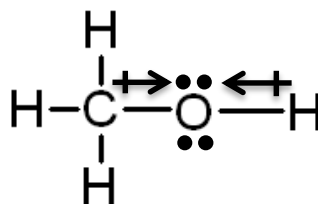
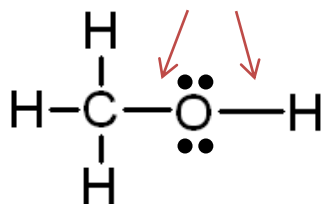


La diferencia de electronegatividad
hace que se produzcan cargas parciales



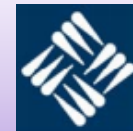
Efecto Inductivo

Enlace covalente polar

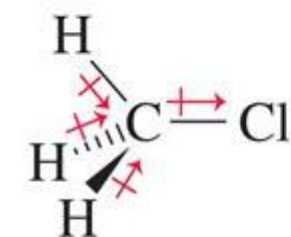


Los átomos de la molécula tienen diferente
predisposición ante un ataque de otra molécula

1.2 Enlace y estructura de la Materia

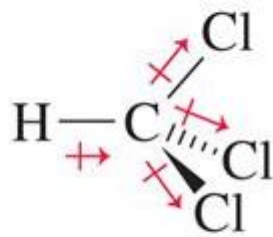


El momento dipolar de la molécula va a depender de la suma vectorial de los momento dipolares individuales



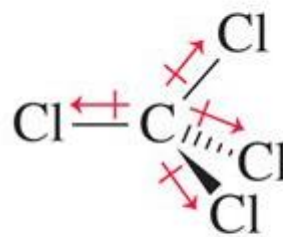
$$\mu = 1.9 \text{ D}$$

Clorometano



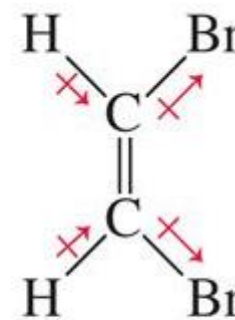
$$\mu = 1.0 \text{ D}$$

Triclorometano
o Cloroformo



$$\mu = 0$$

Tetraclorometano



$$\mu = 1.9 \text{ D}$$

Cis-1,2-dibromoetano

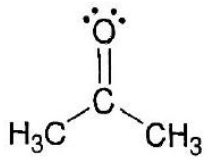
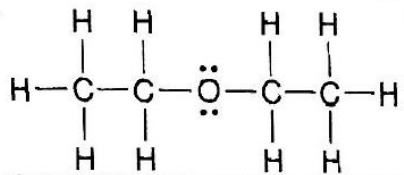
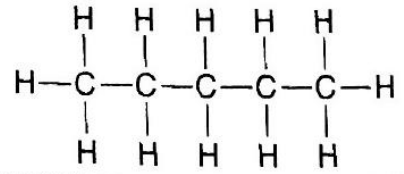
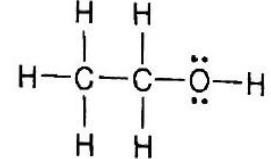
Momento dipolar molecular depende de:
Polaridad del enlace, geometría de la molécula y pares de electrones no compartidos

1.2 Enlace y estructura de la Materia



El momento dipolar de la molécula es responsable de su solvatación

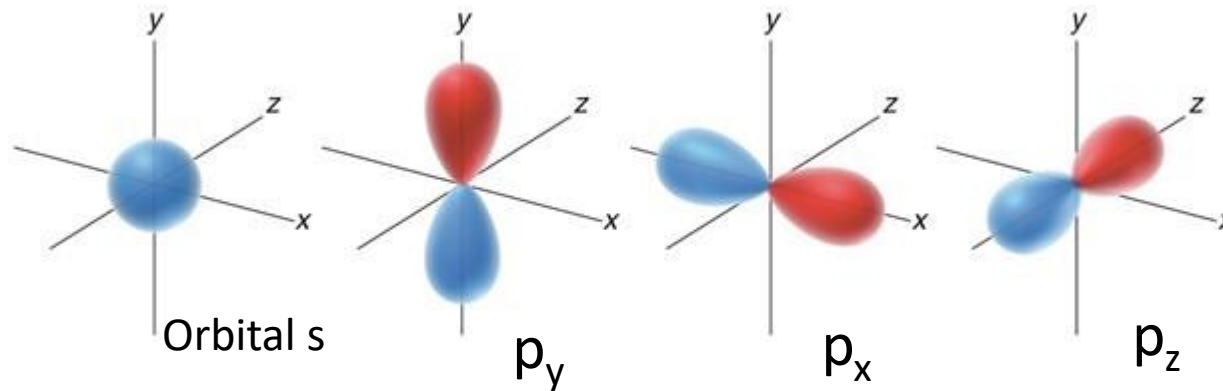
Semejante disuelve a semejante: polar disuelve a polar
apolar disuelve a apolar

COMPUESTO	ESTRUCTURA	MOMENTO DIPOLAR	COMPUESTO	ESTRUCTURA	MOMENTO DIPOLAR
Metanol	CH ₃ OH	2,87 D	Amoníaco	:NH ₃	1,47 D
Acetona		2,69 D	Dimetil éter		1,15 D
Clorometano	CH ₃ Cl	1,87 D	Cloruro de metileno	CH ₂ Cl ₂	1,14 D
Agua	H ₂ O	1,85 D	Pentano		0 D
Etanol		1,66 D	Tetracloruro de carbono	CCl ₄	0 D

1.3 Hibridación y tipos de enlace



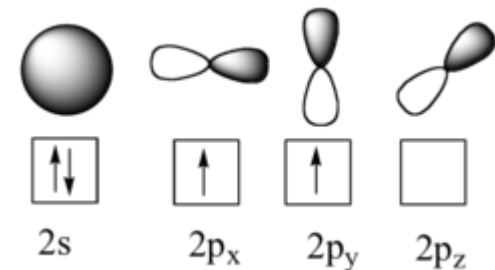
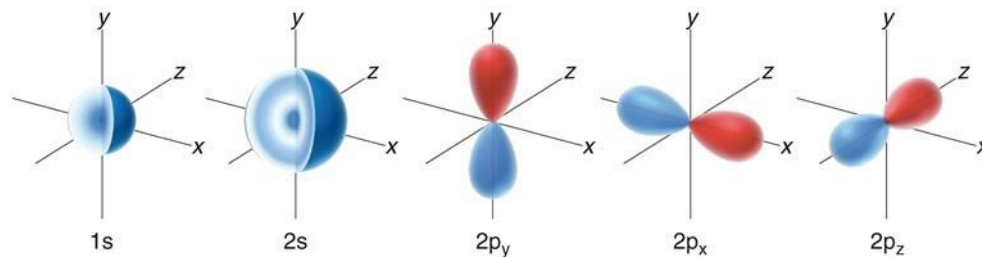
Los electrones se sitúan dentro de los orbitales atómicos



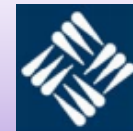
2 electrones en cada orbital

El Carbono tiene configuración electrónica: $1s^2 2s^2 2p^2$

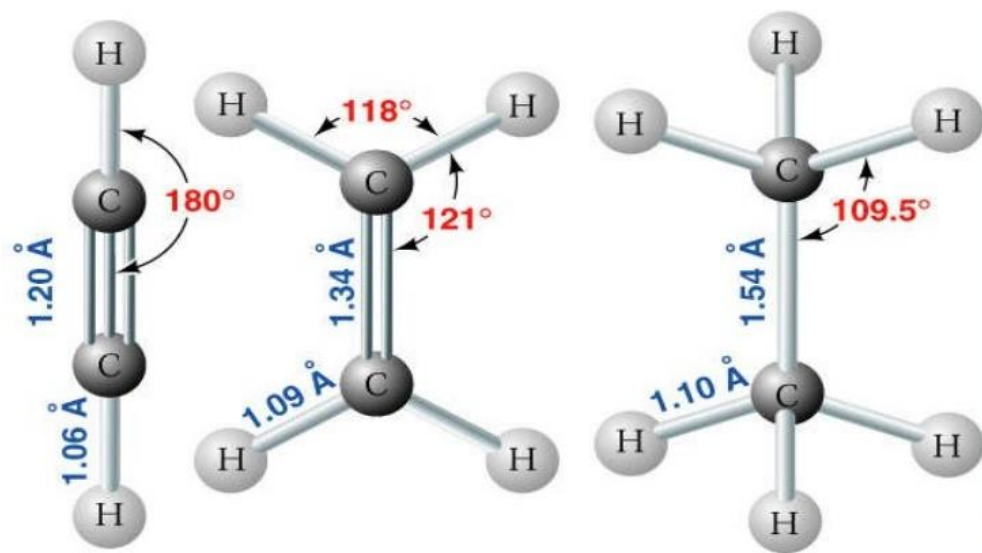
Orbitales de valencia: 2s y 2p



1.3 Hibridación y tipos de enlace



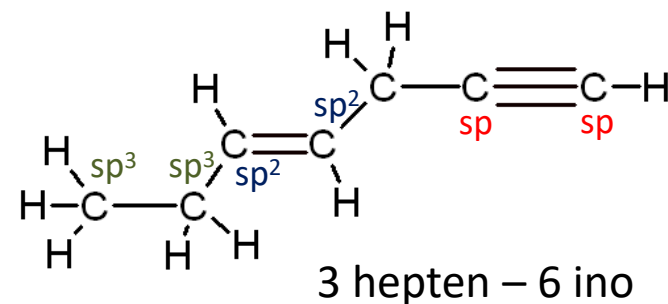
Tipo de Hibridación	Orbitales	Geometría	Ángulos	Uniones	Enlace	Energía del enlace	Longitud de Enlace
sp^3	4 sp^3	Tetraédrica	109.5°	1σ	Sencillo	368 kJ/mol	1,54 Å
sp^2	3 sp^2 + 1p	Trigonal plana	120°	$1\sigma + 1\pi$	Doble	632 KJ/mol	1,34 Å
sp	2 sp + 2p	Lineal	180°	$1\sigma + 2\pi$	Triple	820Kj/mol	1,20 Å



Acetileno

Etileno

Etano

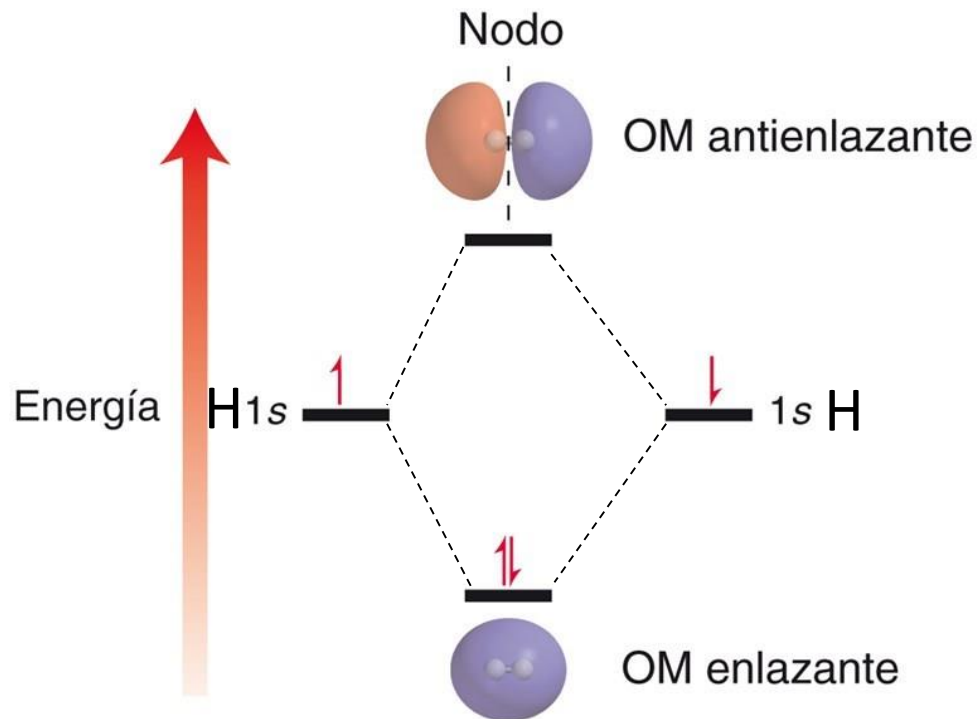


1.4 Teoría de Orbitales Moleculares



- Los **orbitales moleculares** se forman por la combinación o interacción de orbitales atómicos procedentes de dos o más átomos
- Sólo los **electrones de valencia** están implicados en el enlace químico, y solamente los orbitales de valencia se combinan para formar orbitales moleculares
- Los orbitales se **conservan** durante el enlace químico. El número de orbitales que se combinan es siempre igual al número de orbitales moleculares que se forman
- Los orbitales moleculares exhiben **propiedades** similares a los orbitales atómicos. Por ejemplo, cumplen la regla de Hund y el principio de exclusión de Pauli
- Sólo los orbitales atómicos que tienen **propiedades de simetría** idénticas pueden interaccionar entre sí
- La mezcla de los orbitales es más significativa cuando los orbitales atómicos tienen aproximadamente la **misma energía**. A medida que la diferencia de energía entre los orbitales atómicos se incrementa, la efectividad del solapamiento disminuye

1.4 Teoría de Orbitales Moleculares

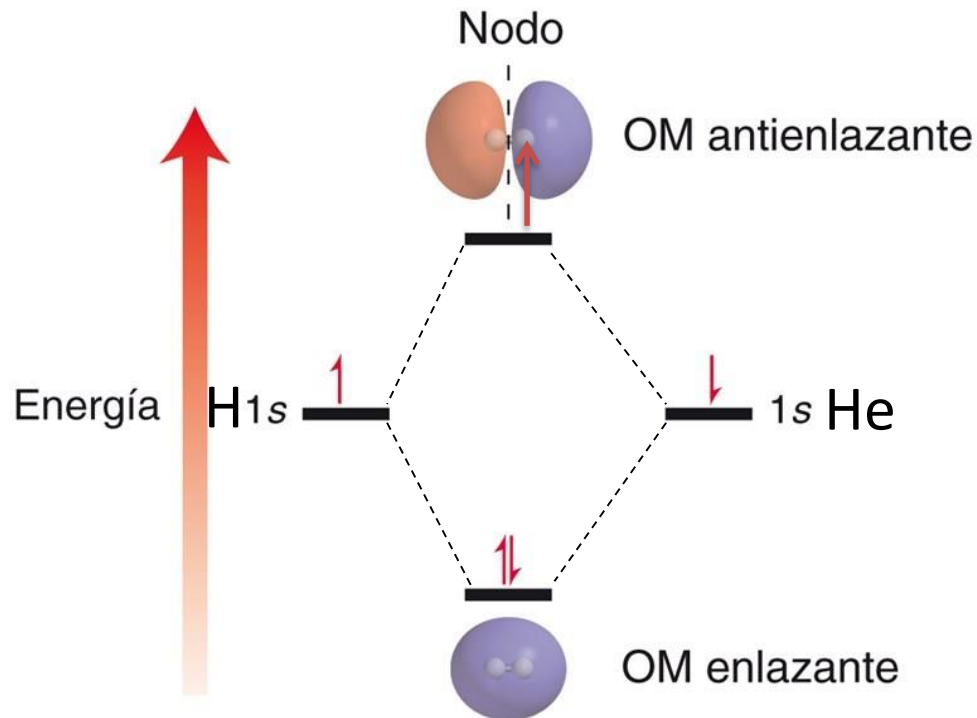


Modelo de Teoría de Orbitales Moleculares para la molécula de H_2

Siempre de cada 2 orbitales atómicos

- Orbital enlazante de baja Energía
- Orbital antienlazante de alta Energía

1.4 Teoría de Orbitales Moleculares

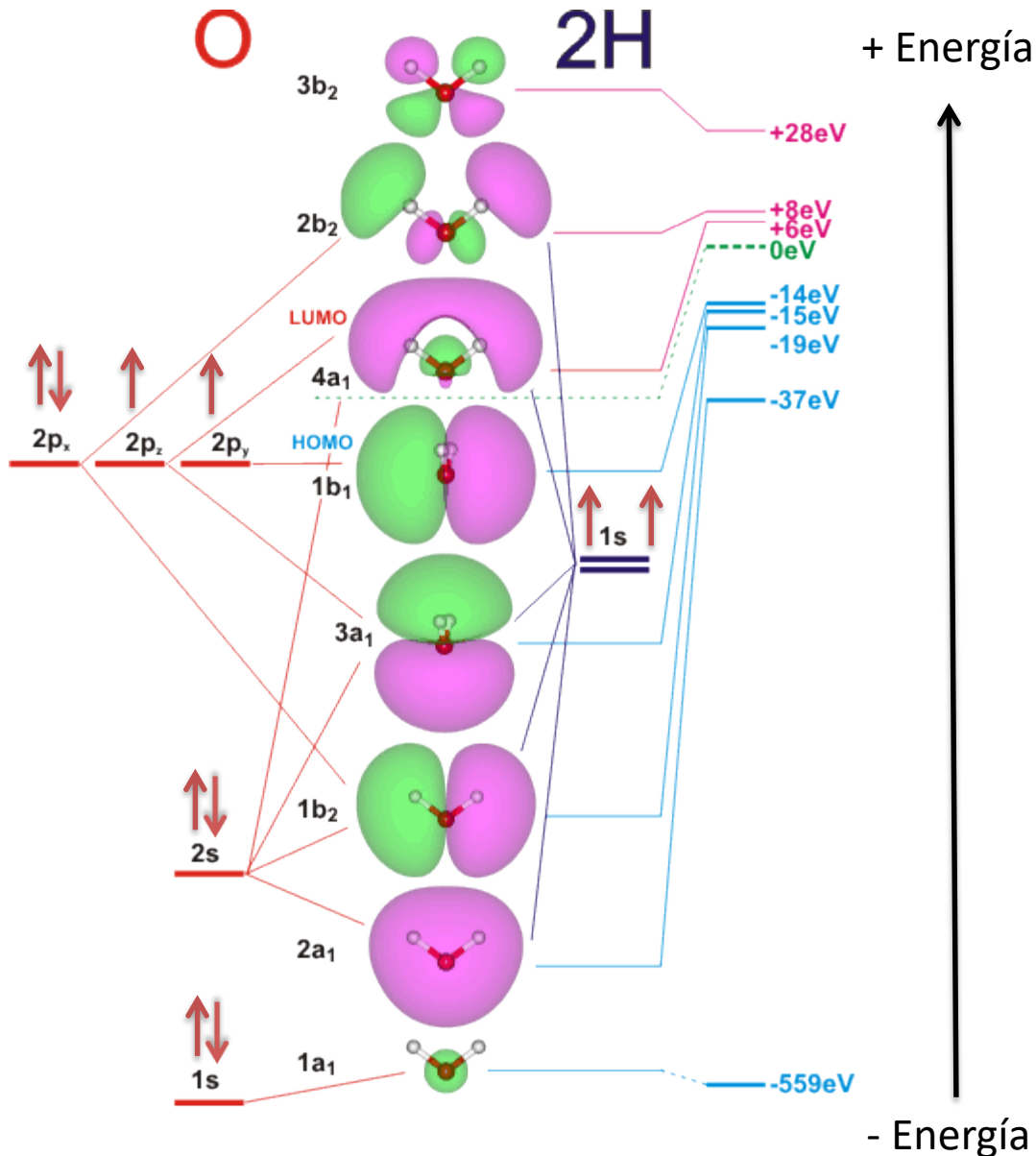


Modelo de Teoría de Orbitales Moleculares para la molécula de H_2

Siempre de cada 2 orbitales atómicos

- Orbital enlazante de baja Energía
- Orbital antienlazante de alta Energía

1.4 Teoría de Orbitales Moleculares



O: 6 electrones de valencia
H: 1 electrón de valencia
Total 8 electrones

2 electrones por OM

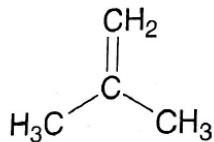
Podemos saber donde está el **HOMO** (Highest Occupied Molecular Orbital) y el **LUMO** (Lowest Unoccupied Molecular Orbital)

GAP: la diferencia de energía entre el HOMO y el LUMO



Las fuerzas intermoleculares van a determinar las propiedades físicas de las moléculas (pto. de ebullición, pto. de fusión)

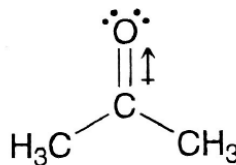
Interacciones dipolo-dipolo: Se dan en moléculas con enlace covalente polar, la interacción entre las cargas parciales formadas dan estabilidad a las moléculas, y sus puntos de fusión y ebullición aumentan con respecto a moléculas con enlace covalente



Isobutileno

Punto de fusión = $-140,3^{\circ}\text{C}$

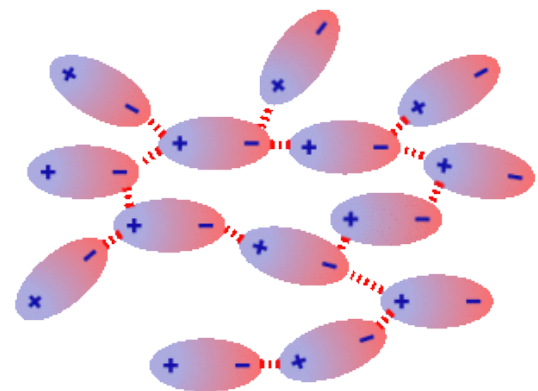
Punto de ebullición = $-6,9^{\circ}\text{C}$

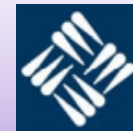


Acetona

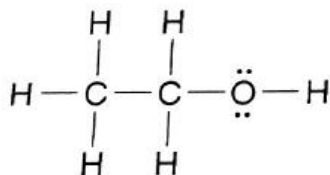
Punto de fusión = $-94,9^{\circ}\text{C}$

Punto de ebullición = $56,3^{\circ}\text{C}$



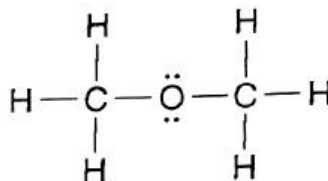


Enlace de Hidrógeno: Se dan cuando un hidrógeno se encuentra unido a un átomo muy electronegativo. (O, N ó F). (aprox. 20 KJ/mol)



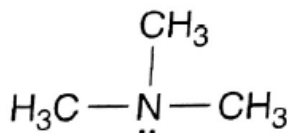
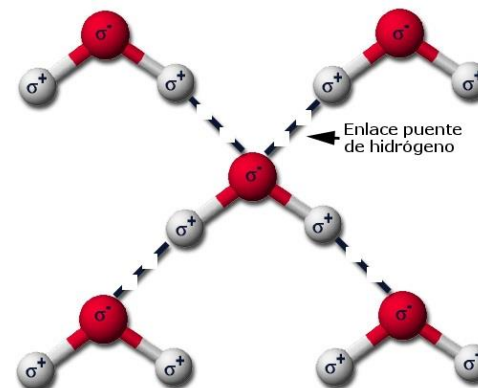
Etanol

Punto de ebullición = 78,4°C



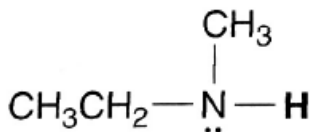
Metoximetano

Punto de ebullición = -23°C



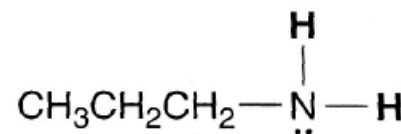
Trimetilamina

Punto de ebullición = 3,5°C



Etilmetilamina

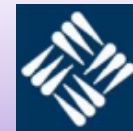
Punto de ebullición = 37°C



Propilamina

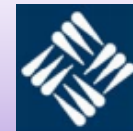
Punto de ebullición = 49°C

Cuanto mayor sea el número de enlaces de hidrógeno mayor será el cambio en las propiedades físicas

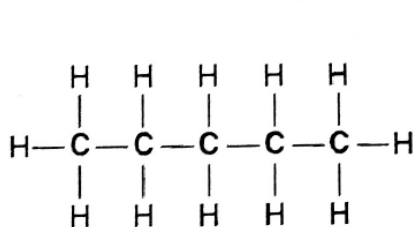


Fuerzas de dispersión (fuerzas de London): En moléculas covalentes los e^- pueden fluir por la molécula generando dipolos instantáneos, el tamaño de la molécula favorece la formación dipolos, las ramificaciones desfavorecen a estas fuerzas (Aprox. 4 KJ/mol)

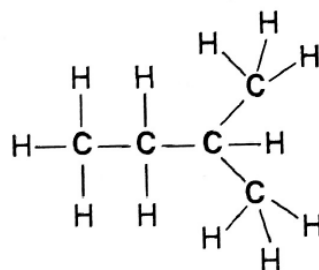
ESTRUCTURA	PUNTO DE EBULLICIÓN (°C)	ESTRUCTURA	PUNTOS DE EBULLICIÓN (°C)
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	-164	$\begin{array}{ccccccc} \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \\ & & & & & & \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ & & & & & & \\ \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \end{array}$	69
Metano		Hexano	
$\begin{array}{cc} \text{H} & \text{H} \\ & \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ & \\ \text{H} & \text{H} \end{array}$	-89	$\begin{array}{ccccccc} \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & & & & \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ & & & & & & \\ \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$	98
Etano		Heptano	
$\begin{array}{ccc} \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ & & \\ \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$	-42	$\begin{array}{ccccccc} \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & & & & \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ & & & & & & \\ \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$	126
Propano		Octano	
$\begin{array}{cccc} \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ & & & \\ \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$	0	$\begin{array}{ccccccc} \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & & & & \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ & & & & & & \\ \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$	151
Butano		Nonano	
$\begin{array}{ccccc} \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & & \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ & & & & \\ \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$	36	$\begin{array}{ccccccc} \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & & & & \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ & & & & & & \\ \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$	174
Pentano		Decano	



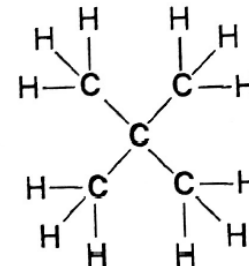
Las ramificaciones no favorecen la formación de fuerzas de dispersión



Pentano
Punto de ebullición = 36°C



2-metilbutano
Punto de ebullición = 28°C



2,2-dimetilpropano
Punto de ebullición = 10°C

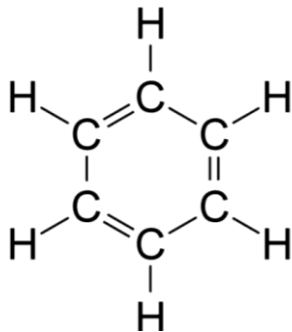
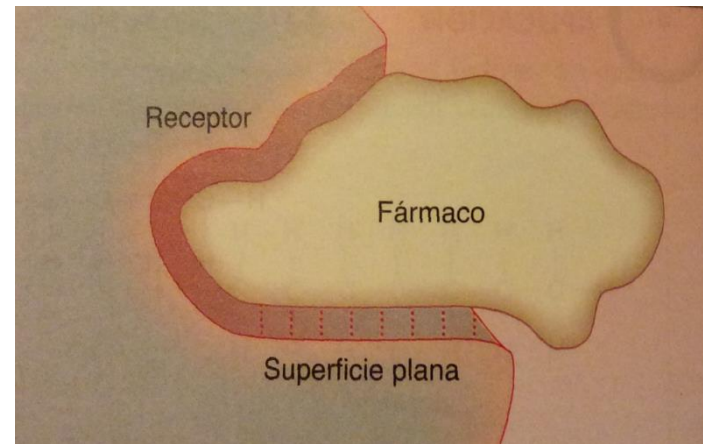
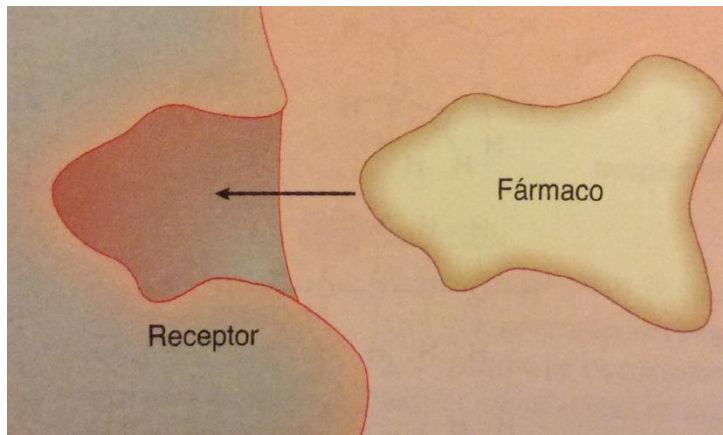
Conocer las fuerzas intermoleculares nos permite comparar prop. Físicas de compuestos con similar estructura

Las fuerzas intermoleculares son las responsables de muchas de las interacciones que se dan entre los compuestos orgánicos

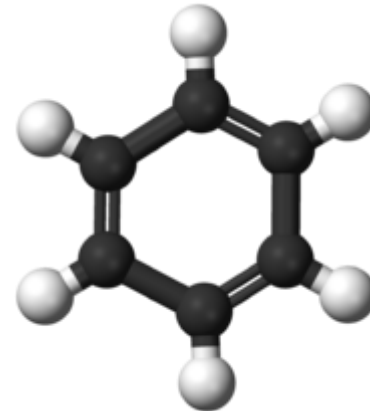
1.5 Fuerzas Intermoleculares y propiedades físicas



La interacción entre un fármaco y un receptor, en muchos casos se deben a las fuerzas intermoleculares



Benceno C_6H_6

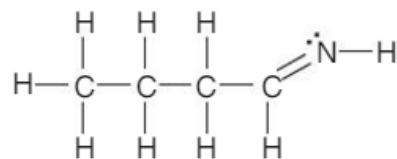


Ejercicios

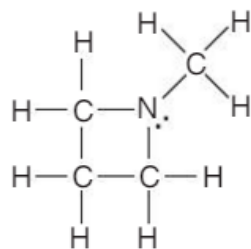


Considere los tres compuestos que se muestran a continuación y responda la siguiente pregunta:

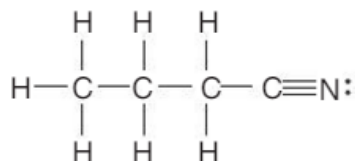
(a) ¿Cuáles dos compuestos son isómeros estructurales?



Compuesto A



Compuesto B



Compuesto C

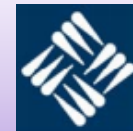
- ¿Cuál compuesto contiene un átomo de nitrógeno con geometría trigonal piramidal?
- Identifique el compuesto con el número más grande de enlaces σ .
- Identifique el compuesto con el menor número de enlaces.
- ¿Cuál compuesto contiene más de un enlace π ?
- ¿Cuál compuesto contiene un átomo de carbono con hibridación sp^2 ?
- ¿Cuál compuesto contiene átomos con hibridación sp^3 (además de los átomos de hidrógeno)?
- ¿Cuál compuesto tendrá el punto de ebullición más elevado? Explique.

Proponga al menos dos estructuras diferentes para un compuesto con seis átomos de carbono que exhiba las siguientes características:

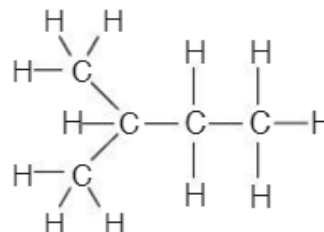
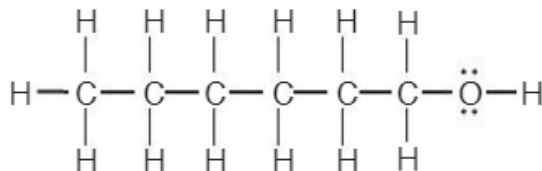
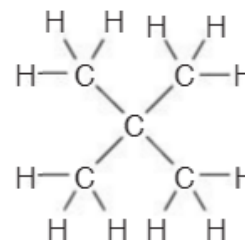
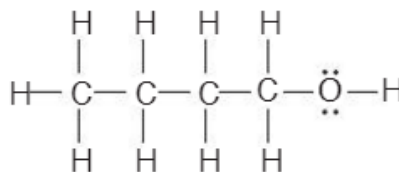
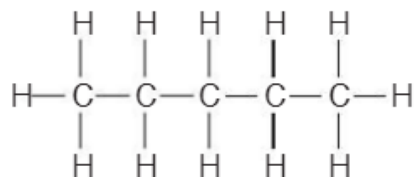
- Los seis átomos de carbono son híbridos sp^2 .
- Sólo un átomo de carbono es híbrido sp , y los restantes cinco átomos de carbono son todos híbridos (recuerde que su compuesto puede tener otros elementos además de carbono e hidrógeno).
- Existe un anillo, y todos los átomos de carbono son híbridos sp^3 .
- Los seis átomos de carbono son híbridos sp , y el compuesto no contiene átomos de hidrógeno (recordar que un enlace triple es lineal y, por ende, no puede estar incorporado en un anillo de seis átomos de carbono).

Un compuesto molecular de fórmula $\text{C}_5\text{H}_{11}\text{N}$ no tiene enlaces π . Cada átomo de carbono está conectado a exactamente dos átomos de hidrógeno. Determine la estructura del compuesto.

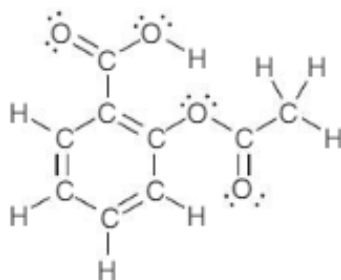
Ejercicios



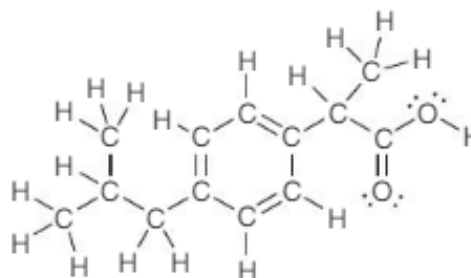
Reordene los siguientes compuestos en orden de punto de ebullición creciente:



A continuación se presentan las estructuras de dos compuestos comunes de venta libre para aliviar el dolor. Determine el estado de hibridación de cada átomo de carbono en estos compuestos:



Ácido acetilsalicílico
(aspirina)



Ibuprofeno