

#### Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo

# Instituto de Ciencias de la Salud

Instituto de Ciencias de la Salud

# Área Académica de Farmacia Química Orgánica I

## MOLECULAR STRUCTURE

## **ESTRUCTURA MOLECULAR**

M. en Q. Sandra Luz De Ita Gutiérrez



## Instituto de Ciencias de la Salud



#### **ESTRUCTURA MOLECULAR**

Matter is build up by atoms and these of subatomics particles: protons, neutrons and electrons. The atoms form bonds with their valence electrons. In organic compounds, the chemical bond is covalent, and because carbon can form chains, is possible a wide variety of organic compounds. Organic compounds contains others elements differents of carbon, like nitrogen, hydrogen and oxygen. Structure is important in Chemistry, because knowing structure of chemical compounds, is possible to obtain information on reactivity, and moreover, establish a relationship between structure and activity.

Key words: atom, chemical bond, electronegativity, formula





Instituto de Ciencias de la Salud

Introducir a los estudiantes en la comprensión de la estructura de los compuestos orgánicos pues éstos son la base para los medicamentos



## IMPORTANCIA DE LA QUÍMICA ORGÁNICA EN EL ÁREA FARMACÉUTICA

$$CH_3$$
 $CH_3$ 
 $CH_3$ 
 $CH_3$ 
 $CH_3$ 
 $CH_3$ 

#### **Ranitidina**

Inhibe producción de ácido estomacal

## **ESTRUCTURA ATÓMICA**

Átomo: bloque de construcción de la materia Mínima parte de un elemento que conserva sus propiedades

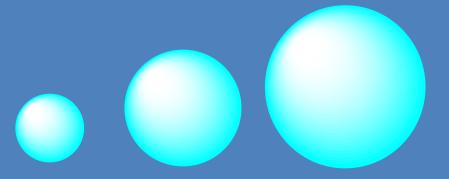
Constituído por partículas subatómicas:

- □ Protones y neutrones que se encuentran en el núcleo
- □ Electrones (partículas con carga negativa) se encuentran en los orbitales atómicos

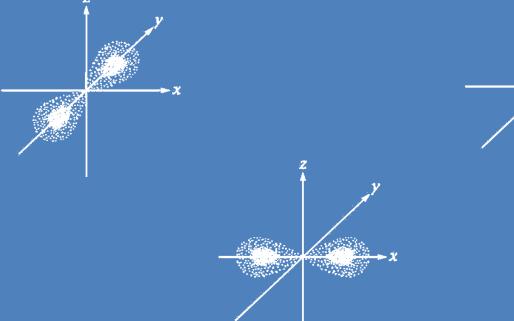
### **Orbital atómico**

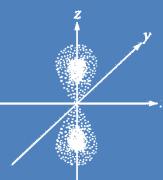
☐ Región del espacio en donde existe una gran la probabilidad de encontrar un electrón

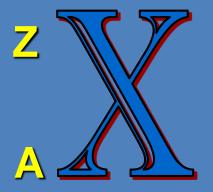
## **Orbitales s**



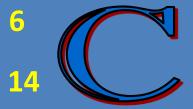
## **Orbitales** p







- X (símbolo del elemento)
- (número de masa): No. protones + No. neutrones
- 7 (número atómico): No. protones



Número atómico, Z = 6 Número de masa, A = 14 Número de neutrones = 14 -6 = 8

## Elementos que se encuentran en los compuestos orgánicos

Además del C, otros elementos que forman parte de los compuestos orgánicos son:

- □ N y P (grupo V)
- OyS (grupo VI)
- ☐ H (grupo I)

Y los halógenos: F, Cl, Br, I (grupo VII)

## **ENLACE QUÍMICO**

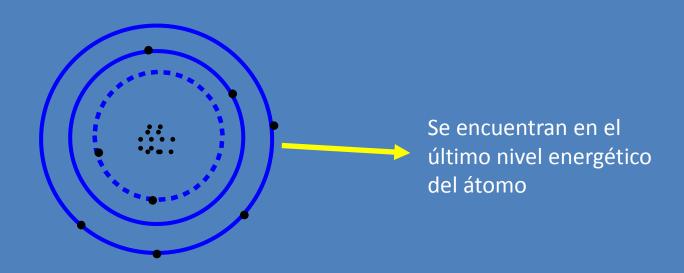
#### ¿Porqué se unen los átomos?

El compuesto que se forma es más estable que los átomos individuales

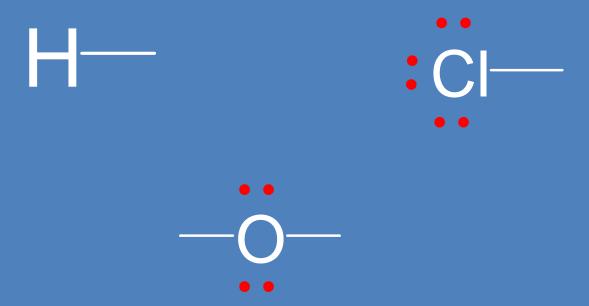
#### ¿Qué es un enlace químico?

Fuerza de atracción intensa entre dos átomos Los electrones que forman los enlaces químicos son los electrones de valencia

## **ELECTRONES DE VALENCIA**



## **ELECTRONES DE VALENCIA**

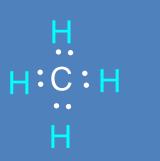


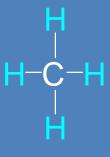
## **ELECTRONES DE VALENCIA**



## FORMACIÓN DE ENLACES CON LOS ELECTRONES DE VALENCIA

Para formar metano (CH<sub>4</sub>) hay que formar enlaces entre un átomo de C y 4 átomos de H usando los electrones de valencia de cada átomo





#### **ELECTRONEGATIVIDAD**

Medida de la capacidad de un átomo unido a otro de atraer los electrones hacia él.

Los valores de E.N. Son útiles para predecir el tipo de enlace que se puede formar entre átomos de diferentes elementos.

### **ELECTRONEGATIVIDAD**

- 1) Aumenta a lo largo de un periodo de izquierda a derecha
- 2) Disminuye en una columna de arriba hacia abajo



#### **POLARIDAD DE ENLACE**

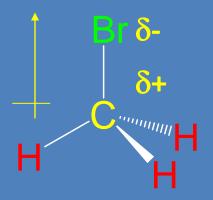
Un enlace es polar cuando la diferencia de electronegatividad del enlace es de 0.5 a 1.9

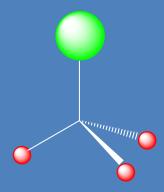
#### **Enlace covalente polar**

La carga parcial negativa siempre se localizará sobre el átomo mas electronegativo

#### **POLARIDAD DE ENLACE**

Para saber si un enlace covalente es polar, se calcula la diferencia de electronegatividad, si ésta es mayor o igual a 0.5 se considera como un enlace polar





**Bromometano** 

Bromo 2.8 Carbono 2.1 Diferencia = 0.7

**Enlace covalente polar** 

## **ENLACE IÓNICO**

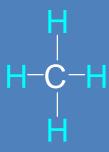
#### Diferencia de electronegatividad mayor de 1.9

- ☐ Formado por la transferencia de uno o mas electrones de un átomo a otro para formar iones
- ☐ Generalmente se forman por la combinación de un metal y un no metal
- ☐ Las substancias iónicas, tienen puntos de fusión elevados

### **ENLACE COVALENTE**

#### Diferencia de electronegatividad menor de 1.9

- ☐ Resulta de la compartición de electrones entre dos átomos
- ☐ Generalmente se forma entre dos no metales, por ejemplo C-H



## FÓRMULA MOLECULAR

Indica el número de átomos de cada elemento que hay en una molécula.

La fórmula que se muestra a continuación es una fórmula molecular, y nos indica que nuestro compuesto está formado por 6 átomos de carbono, 6 átomos de hidrógeno y 1 átomo de oxígeno



### FÓRMULA ESTRUCTURAL: CONDENSADA Y DESARROLLADA

En este tipo de fórmulas se escriben los enlaces C-H mediante líneas

#### Fórmula desarrollada

Muestra como están conectados los átomos entre si

#### Fórmula condensadas

En este tipo de fórmulas no se escriben los enlaces C-H, estos se sobreentienden

## **ESTRUCTURA DE ESQUELETO**

En este tipo de estructura sólo se muestran los enlaces, y los átomos diferentes de C e H

## **BIBLIOGRAFÍA**

- 1. McMurry J., en *Química Orgánica*; Thompson Learning, México, D. F., **2004**.
- 2. Carey F. A., Sundberg R. J., en *Advanced Organic Chemistry* Part A: Structure and Mechanism; Plenum Publishers, U.S.A., **2000**.
- 3. Solomons G. T. W., en *Química Orgánica*; Limusa; segunda edición. México D. F., **2002**.
- 4. Clayden J., Greeves N., Warren S., en *Organic Chemistry*; Oxford University Press, U.K., **2001**.
- 5. Farmacopea de los Estados Unidos Mexicanos. Novena edición. **2009**.
- 6. Brown T., Le May H. E., et, al., en *Química la Ciencia Central*; Pearson Education, México, D. F., **2004**.