INTRODUCCIÓN A LA REPRESENTACIÓN MOLECULAR

Dr. Pablo E. Rosi

Colección: LAS CIENCIAS NATURALES Y LA MATEMÁTICA

Colección: LAS CIENCIAS NATURALES Y LA MATEMÁTICA

INTRODUCCIÓN A LA REPRESENTACIÓN MOLECULAR

Dr. Pablo E. Rosi

ADVERTENCIA

La habilitación de las direcciones electrónicas y dominios de la web asociados, citados en este libro, debe ser considerada vigente para su acceso, a la fecha de edición de la presente publicación. Los eventuales cambios, en razón de la caducidad, transferencia de dominio, modificaciones y/o alteraciones de contenidos y su uso para otros propósitos, queda fuera de las previsiones de la presente edición -Por lo tanto, las direcciones electrónicas mencionadas en este libro, deben ser descartadas o consideradas, en este contexto-.

Distribución de carácter gratuito.

autoridades

Presidente de la Nación
Dra. Cristina Fernández de Kirchner

Ministro de Educación
Dr. Alberto E. Sileoni

Secretaria de Educación
Prof. María Inés Abrile de Vollmer

Directora Ejecutiva del Instituto Nacional de Educación Tecnológica
Lic. María Rosa Almandoz

Director Nacional del Centro Nacional de Educación Tecnológica
Lic. Juan Manuel Kirschenbaum

Director Nacional de Educación Técnico Profesional y Ocupacional
Ing. Roberto Díaz

Ministerio de Educación.
Instituto Nacional de Educación Tecnológica.
Saavedra 789. C1229ACE.
Ciudad Autónoma de Buenos Aires.
República Argentina.
2010

INTRODUCCIÓN A LA

REPRESENTACIÓN MOLECULAR

Dr. Pablo E. Rosi

Colección: LAS CIENCIAS NATURALES Y LA MATEMÁTICA

Colección “Las Ciencias Naturales y la Matemática”.
Director de la Colección: Juan Manuel Kirschenbaum
Coordinadora general de la Colección: Haydeé Noceti.

Queda hecho el depósito que previene la ley N° 11.723. © Todos los derechos reservados por el Ministerio de Educación - Instituto Nacional de Educación Tecnológica.

La reproducción total o parcial, en forma idéntica o modificada por cualquier medio mecánico o electrónico incluyendo fotocopia, grabación o cualquier sistema de almacenamiento y recuperación de información no autorizada en forma expresa por el editor, viola derechos reservados.

Industria Argentina

ISBN 978-950-00-0752-8

Director de la Colección:
Lic. Juan Manuel Kirschenbaum
Coordinadora general y académica de la Colección:
Prof. Ing. Haydeé Noceti
Diseño didáctico y corrección de estilo:
Lic. María Inés Narvaja
Ing. Alejandra Santos
Coordinación y producción gráfica:
Tomás Ahumada
Diseño gráfico:
Augusto Bastons
Federico Timerman
Ilustraciones:
Federico Timerman
Retoques fotográficos:
Roberto Sobrado
Diseño de tapa:
Tomás Ahumada
Administración:
Cristina Caratozzolo
Néstor Hergenrether
Colaboración:
Téc. Op. en Psic. Soc. Cecilia L. Vazquez
Dra. Stella Maris Quiroga

Nuestro agradecimiento al personal del Centro Nacional de Educación Tecnológica por su colaboración.

Rosi, Pablo
Introducción a la representación molecular / Pablo Rosi; dirigido por Juan Manuel Kirschenbaum.
- 1a ed. - Buenos Aires: Ministerio de Educación de la Nación. Instituto Nacional de Educación Tecnológica, 2010.
188 p.: il.; 24x19 cm. (Las ciencias naturales y la matemática / Juan Manuel Kirschenbaum.)

ISBN 978-950-00-0752-8

1. Química.
2. Enseñanza Secundaria.
I. Título

CDD 540.712

Fecha de catalogación: 19/01/2010

Impreso en Anselmo L. Morvillo S. A., Av. Francisco Pienovi 317 (B1868DRG), Avellaneda, Pcia. de Buenos Aires, Argentina.

Tirada de esta edición: 100.000 ejemplares

Dr. Pablo E. Rosi

El Autor

Pablo Eduardo Rosi es Doctor en Química Biorgánica, y Licenciado en Ciencias Biológicas (Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires). Posee un postgrado como Especialista en Aplicaciones Tecnológicas de la Energía Nuclear (Instituto Balseiro, Facultad de Ingeniería –UBA–, Comisión Nacional de Energía Atómica). Se desempeña como docente de Física e Introducción a la Biofísica (Ciclo Básico Común – UBA) y es Instructor del área Bioquímica (Universidad Nacional de Quilmes).

ÍNDICE

Introducción 8

Capítulo 1
Constituyentes de la materia
De la tabla periódica a la representación en el plano 10
- Rompiendo ladrillos 10
- Ordenando ladrillos o la tabla periódica de elementos (Mendeleev - 1869) 12
- Construyendo paredes o la teoría de electrones de valencias (Lewis - 1916) 14
- Tipos de enlaces 23
- Herramientas de dibujo 27
- Actividad 32
- El ladrillo modelo siglo XX o el modelo atómico contemporáneo 33

Capítulo 2
Gases o el modelo molecular más simple (y muy conveniente): una esfera 35
- Breve reseña histórica 35
- "Comenzando a describir esas cosas llamadas gases"
  Ley de Dalton y Ecuación General del Gas Ideal 35
- El mol 41
- Volumen molecular 43
- Actividad 45

Capítulo 3
La forma de las moléculas 47
- Teoría de repulsión de pares electrónicos de valencia (TRePEV)
  o cómo estar lo más lejos posible 47
- Análisis geométrico 48
- Geometría lineal 48
- Geometría trigonal planar 49
- Geometría tetraédrica 50
- Otras geometrías 55
- Efecto de los electrones no compartidos 56
- Efecto de un par electrónico no compartido central en moléculas de tres átomos 56
- Efecto de dos pares electrónicos no compartidos centrales
  en moléculas de tres átomos 58

- Efecto de un par electrónico desapareado central en moléculas de cuatro átomos 59
- Las geometrías que puede ofrecernos el carbono 60
- Combinaciones 60

Capítulo 4

Codificación de la geometría o, ¿cómo se lo digo a la computadora? 61

- Variaciones en la conexión entre átomos 61
- Representación en el plano de un carbono asimétrico 64
- Codificación o cómo escribimos todo esto 64
- Marco de referencia 64
- Actividad 66
- Generación de modelos moleculares y su observación 68
- Generación 68
- PRODRG 71
- Código SMILES 76
- Visualización 79
- Deep View / Swiss PDB – Viewer 79

Capítulo 5

Qué se puede hacer en el espacio o ¡Hagamos cuentas! 87

- Calculemos distancias 87
- En una dimensión. La línea recta 87
- En dos dimensiones. El plano 89
- En tres dimensiones. El espacio 92
- Traslación 93
- Rotación a lo largo de un enlace 93
- Intento de generalización 147
- Actividad 154

Apéndice 158

Resolución de ejercicios 161

Glosario 185

Bibliografía 188