

## Manual de Instrucciones

### Kit molecular Química Orgánica, alumno (ref. QBR003)

#### Descripción:

Los modelos de moléculas orgánicas proporcionan una representación física del arreglo tridimensional de los átomos en el espacio. En el estudio de la Química Orgánica el uso de este kit le ayudará a entender mejor las propiedades químicas y físicas de las moléculas. El kit consta de:

Contenido	
Átomos	Enlaces
20 Carbono (Negro)	50 cortos (Blanco)
30 Hidrógeno (Blanco)	
6 Oxígeno (Rojo)	41 medios (Gris)
8 Halógeno (Verde)	12 largos flexibles (Gris)
2 Fósforo (Morado)	
6 Nitrógeno (Azul)	
2 Azufre (Naranja)	
2 Metal (Gris)	

Al construir un modelo molecular será útil indicar cuál poliedro usará para cada átomo en la fórmula molecular. El uso de poliedros diferentes con distintos colores para átomos diferentes le facilita el seguimiento del átomo al crear y analizar isómeros.

#### Enlaces, tipo de enlace y usos:

- Los enlaces medios de color gris se usan para enlaces covalentes simples.
- Los enlaces largos de color gris se usan para enlaces covalentes dobles o triples.
- Los enlaces cortos de color blanco se pueden usar en lugar de los medios estándar para hacer modelos compactos.

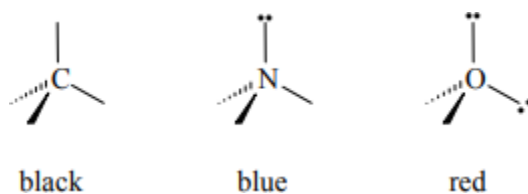
#### Estructura tetraédrica:

¡Las piezas tetraédricas no deben confundirse con las piezas finales doble enlace de color gris! Hay piezas tetraédricas de color negro, rojo y azul, que son los colores estándar para el carbono, oxígeno y nitrógeno, respectivamente. Para ensamblar un centro tetraédrico tome dos piezas tetraédricas (usualmente del mismo color) y


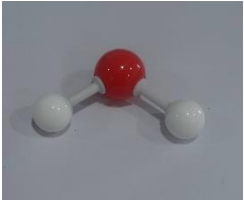
júntelas. Un centro tetraédrico representa un átomo con cuatro grupos unidos. Un grupo puede ser un enlace o un par de electrones.

Ensamble centro tetraédricos a partir de piezas tetraédricas de cada color. Note que los cuatro brazos o “enlaces” están dispuestos en ángulos de  $109.5^\circ$ . El centro negro representa un átomo de carbono, con cuatro enlaces. El centro azul representa un átomo de nitrógeno, con tres enlaces y un solitario par de electrones. El centro rojo representa un átomo de oxígeno con dos enlaces y dos pares de electrones solitarios.

Para representar el metano ( $\text{CH}_4$ ) puede usar cuatro bolas blancas (los átomos de hidrógeno) acopladas al centro tetraédrico negro; el amoníaco ( $\text{NH}_3$ ) y el agua ( $\text{H}_2\text{O}$ ) pueden representarse usando tres y dos bolas blancas, respectivamente. Sin embargo, las moléculas más grandes tendrán demasiados hidrógenos, y dada la limitada cantidad de bolas blancas este método no es práctico. Una alternativa es representar el solitario par de electrones con una bola coloreada y los átomos de hidrógeno con los extremos vacíos. También, el oxígeno divalente (como el del agua) puede representarse por una pieza tetraédrica roja sencilla.



$\text{CH}_4$	
$\text{CH}_2\text{Cl}_2$	

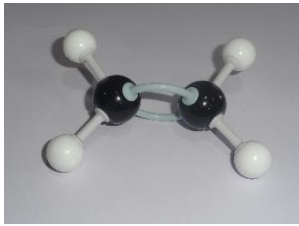
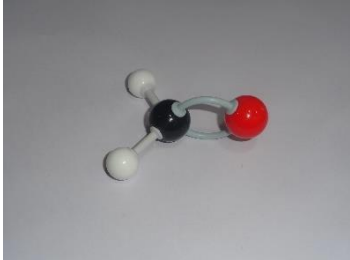
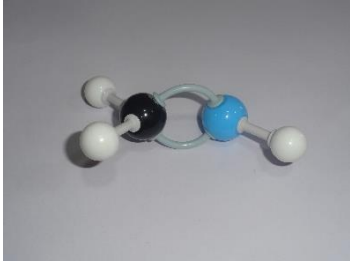
NH <sub>3</sub>	
H <sub>2</sub> O	

### Doble enlace:

Las piezas de doble enlace son de varios tipos: piezas finales, que son de color gris; doble enlaces de color gris; y medio enlaces, que son de color gris o rojo. Las piezas de color gris se usan para representar los átomos de carbono y los doble enlaces carbono-carbono; para representar un doble enlace carbono-carbono, encaje una pieza final gris en cada extremo de uno de los dobles enlaces grises.

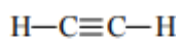
Los doble enlaces carbono-oxígeno – grupos carbonilo – pueden representarse usando los medio enlaces de color gris y rojo. Para representar un grupo carbonilo, primero junte un medio enlace rojo y uno gris; luego encaje una pieza final gris en el extremo gris del doble enlace.

Los doble enlaces carbono-nitrógeno son más raros en la Química Orgánica y el hecho de que la valencia del nitrógeno no está llena significa que un grupo puede estar unido al nitrógeno. Para representar un doble enlace carbono-nitrógeno tome una pieza de doble enlace gris. Encaje una pieza final gris en un extremo para representar el carbono y una pieza tetraédrica azul en el otro extremo para el nitrógeno.

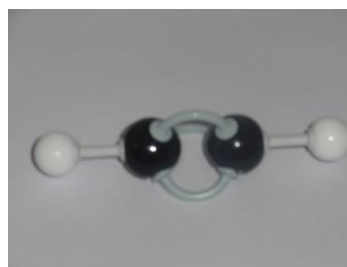
$  \begin{array}{c}  \text{H} & & \text{H} \\  & \diagdown & / \\  & \text{C} = \text{C} & \\  & / & \diagdown \\  \text{H} & & \text{H}  \end{array}  $ <p style="text-align: center;">ethene</p>	
$  \begin{array}{c}  \text{H} \\    \\  \text{C} = \ddot{\text{O}} \\    \\  \text{H}  \end{array}  $ <p style="text-align: center;">methanal</p>	
$  \begin{array}{c}  \text{H} \\    \\  \text{C} = \ddot{\text{N}} \\    \\  \text{H}  \end{array}  $	

### Triple enlace:

Los triple enlaces se representan usando las piezas de triple enlace de color gris. Cada pieza representa dos átomos de carbono con un triple enlace entre ellos y una valencia abierta para cada átomo. Note que los triple enlaces tienen un ángulo normal de unión de  $180^\circ$ . Los triple enlaces carbono-nitrógeno son también posibles (denominados grupos ciano o nitrilo), pero no hay una forma diferente de representarlos con este kit.

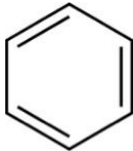
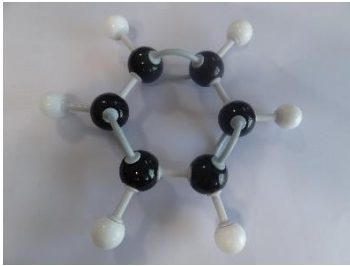


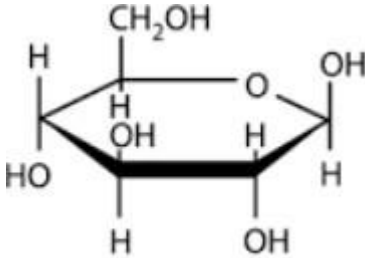
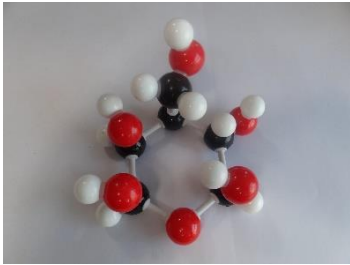


ethyne



### **Hidrocarburos cíclicos:**

Un hidrocarburo cíclico es un compuesto formado solamente por carbono e hidrógeno en forma de anillo. Un cicloalcano es un hidrocarburo cíclico que contiene solamente simple enlaces carbono - carbono. Un cicloalqueno y un cicloalquino son hidrocarburos cíclicos que contienen doble y triple enlaces carbono - carbono, respectivamente.

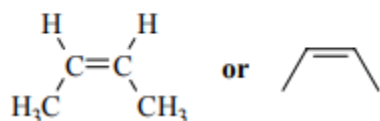
	
	
	

A continuación se muestra información de algunas moléculas; haga el modelo según la estructura de las moléculas.

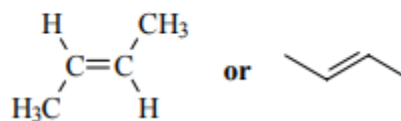
### **Estereoisómeros: diaestereómeros cis-trans**

Los dos posibles isómeros del 2-buteno son el cis-2-buteno y el trans-2-buteno; cis indica que los sustituyentes están dispuestos en el mismo lado del doble enlace, mientras que trans indica lados opuestos. Estos son estereoisómeros; los átomos están conectados de la misma forma, pero dispuestos en el espacio de forma diferente.

*cis*-2-butene

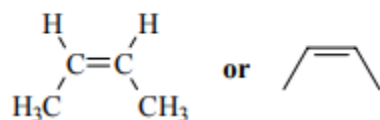


*trans*-2-butene

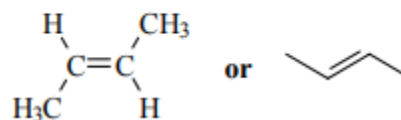


Para los alquenos hay una forma más general de indicar la orientación *cis/trans*: la nomenclatura *E/Z*. *Z* hace referencia a la palabra alemana *zusammen* (juntos) y corresponde a *cis*; *E* viene de *entgegen* (opuesto) y corresponde a *trans*. El uso de estas denominaciones se discute en los libros de texto; aquí es suficiente señalar que otra forma de nombrar los dos diaestereómeros del 2-butenoe es:

*Z*-2-butene



*E*-2-butene



De forma similar se pueden crear los modelos de las numerosas moléculas orgánicas.

## Instruction Manual

### Molecular models set, Organic Chemistry, student (code QBR003)

#### Description:

Models of organic molecules provide a physical representation of the three-dimensional arrangement of atoms in space. Using a molecular model kit throughout your study of organic chemistry will enable you to better understand both the chemical and physical properties of the molecules you encounter. The kit consists of:

Contents	
Atomic Parts	Links
20 Carbon (Black)	50 short (white)
30 Hydrogen (White)	
6 Oxygen (Red)	41 Medium (Gray)
8 halogen (Green)	12 Long flexible (Gray)
2 Phosphorus (Purple)	
6 Nitrogen (Blue)	
2 Sulphur (Orange)	
2 Metal (Gray)	

When building a molecular model it will be helpful to designate which polyhedron you will use for each atom in a molecular formula. Using different polyhedron with different colors for different atoms make it easier for you to keep track of atom when creating and analyzing isomers.

#### Links, bond type and uses:

- Medium grey links are used for single covalent bonds
- Long grey links are used for double or triple covalent bonds
- Short white links can be used instead of standard medium link to make compact models.

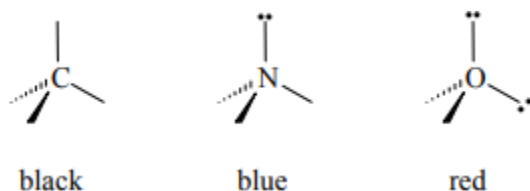
#### Tetrahedral structure:

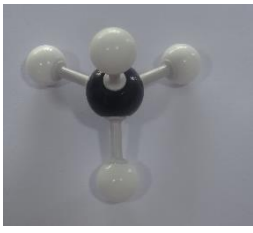

Tetrahedral pieces should not be confused with the gray double-bond end-pieces! There are black, red, and blue tetrahedral pieces, which are the standard (or CPK) colors for carbon, oxygen, and nitrogen, respectively. To assemble a tetrahedral center, take two tetrahedral pieces (usually of the same color) and snap them


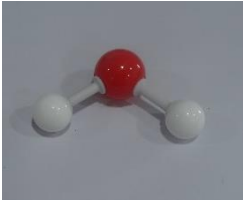
together. A tetrahedral center represents an atom with four groups attached. A group can be either a bond or a lone pair of electrons pairs.

Assemble tetrahedral centers from tetrahedral pieces of each color. Notice that the four arms or “bonds” are arranged at angles of  $109.5^\circ$ . The black center represents a carbon atom, with four bonds. The blue center represents a nitrogen atom, with three bonds and a lone pair of electrons. The red center represents an oxygen atom, with two bonds and two lone pairs.

To represent methane ( $\text{CH}_4$ ), you may use four white balls (representing hydrogen atoms) attached to the black tetrahedral center; ammonia ( $\text{NH}_3$ ) and water ( $\text{H}_2\text{O}$ ) can be represented by using three and two white balls, respectively. However, larger molecules will have too many hydrogens for this method to be practical, given your limited supply of white balls. One alternative is to represent a lone pair of electrons by a colored ball, and let blank ends represent hydrogen atoms! Also, divalent oxygen (as in water) can be represented by a single red tetrahedral piece.



$\text{CH}_4$	
$\text{CH}_2\text{Cl}_2$	

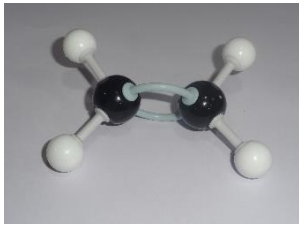
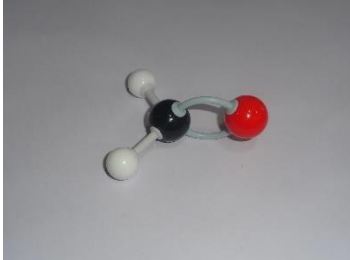
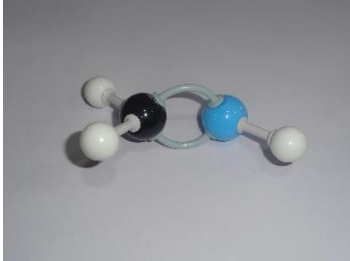
$\text{NH}_3$	
$\text{H}_2\text{O}$	

### Double Bond:

Double-bond pieces include several types: end-pieces, which are gray; gray double bonds; and half-bonds which are either gray or red. The gray pieces are used to represent carbon atoms and carbon-carbon double bonds; in order to represent a carbon-carbon double bond, snap a gray end-piece into each end of one of the gray double bonds.

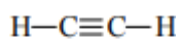
Carbon-oxygen double bonds - carbonyl groups - may be represented using the gray and red half-bonds. To represent a carbonyl group, first snap together one red and one gray half-bond; then snap a gray end piece into the gray end of the double bond.

Carbon-nitrogen double bonds are rarer in organic chemistry, and the fact that the nitrogen's valence is not filled means that a group may be bonded to nitrogen. To represent a carbon-nitrogen double bond, take a gray double bond piece. Snap a gray end-piece into one end to represent carbon, and a blue tetrahedral piece into the other end for nitrogen.

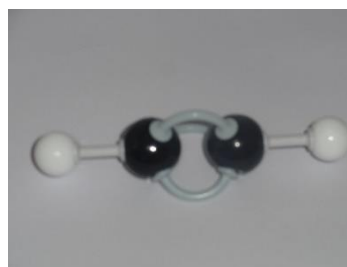
$  \begin{array}{c}  \text{H} & & \text{H} \\  & \diagdown & / \\  & \text{C}=\text{C} & \\  & / & \diagdown \\  \text{H} & & \text{H}  \end{array}  $ <p style="text-align: center;">ethene</p>	
$  \begin{array}{c}  \text{H} \\    \\  \text{C}=\ddot{\text{O}} \\    \\  \text{H}  \end{array}  $ <p style="text-align: center;">methanal</p>	
$  \begin{array}{c}  \text{H} \\    \\  \text{C}=\ddot{\text{N}} \\    \\  \text{H}  \end{array}  $	

### Triple Bond:

Triple bonds are represented using the gray triple-bond pieces. Each piece represents TWO carbon atoms with a triple bond between them and one open valence for each atom. Notice that triple bonds have a normal bond angle of  $180^\circ$ . Carbon-nitrogen triple bonds are also possible (such bonds are referred to as cyano or nitrile groups), but there is no distinct way to represent them with this model kit.

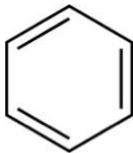
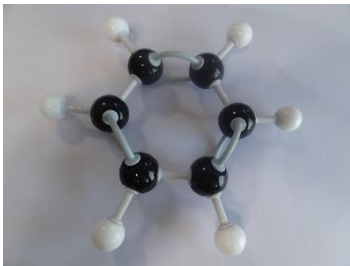


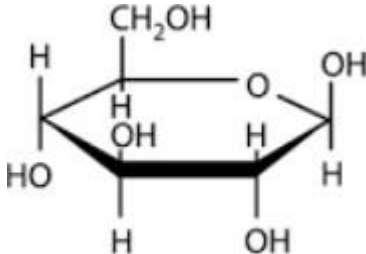
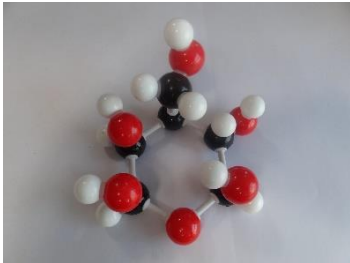


ethyne



### **Cyclic hydrocarbon:**

A cyclic hydrocarbon is a compound composed only of carbon and hydrogen that forms a ring. A cycloalkane is a cyclic hydrocarbon that contains only carbon - carbon single bonds. A cycloalkene and cycloalkyne are cyclic hydrocarbons that contain carbon - carbon double and triple bonds, respectively.

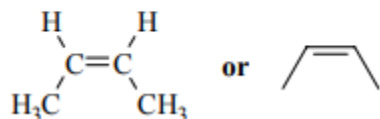
	
	
	

Below is shown the information of some molecules; make the model according to the structure of the molecules.

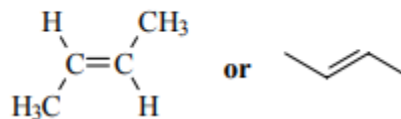
### **Stereoisomers: Cis-trans diastereomers**

The two possible isomers of 2-butene are cis-2-butene and trans-2-butene; cis indicates that substituents are arranged on the same side of the double bond, while Trans indicates opposite sides. These are stereoisomers; the atoms are connected in the same way but arranged differently in space.

*cis*-2-butene

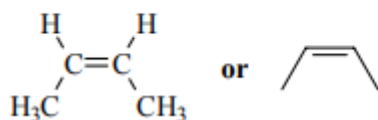


*trans*-2-butene

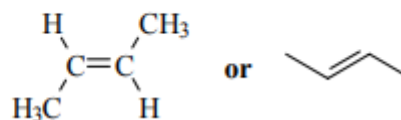


For alkenes, there is a more general way of indicating *cis*/*trans* orientation: E/Z nomenclature. Z stands for the German word *zusammen* (together) and corresponds to *cis*; E stands for *entgegen* (opposite) and corresponds to *trans*. The use of these designations is discussed in your text and will be covered in lecture; for our present purpose it is sufficient to point out that another way of naming the two diastereomers of 2-butene is:

**Z**-2-butene



**E**-2-butene



Similarly we can form the model of the numerous molecules related to organic chemistry.