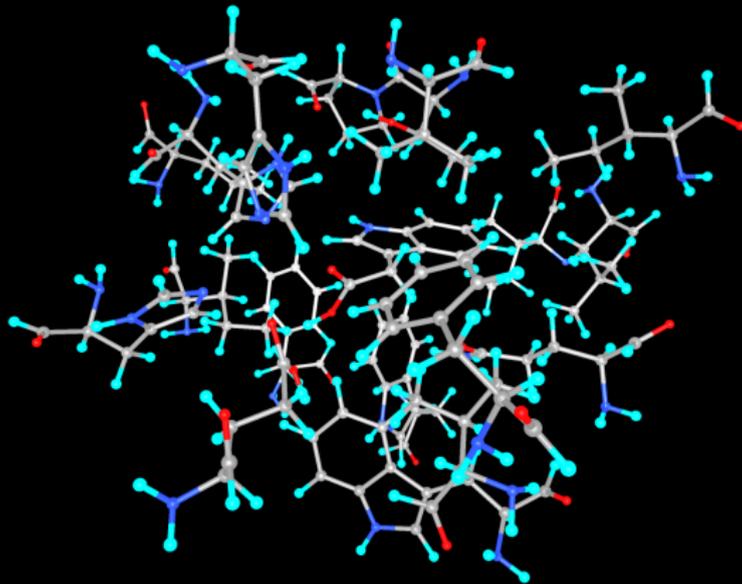


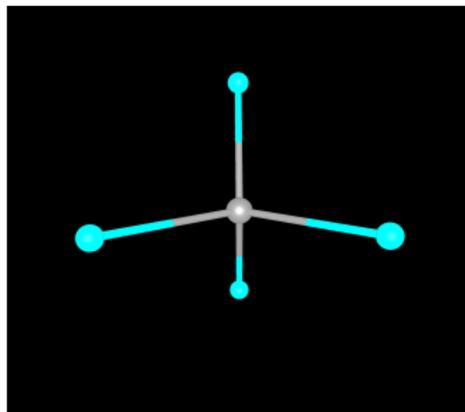
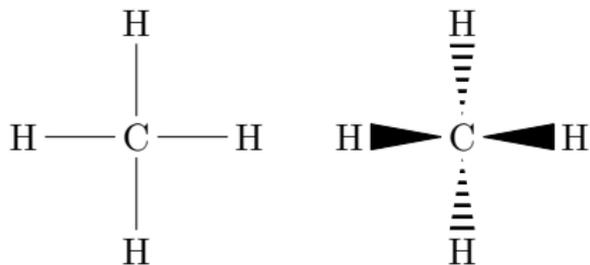
Química Orgánica.



Química Orgánica.

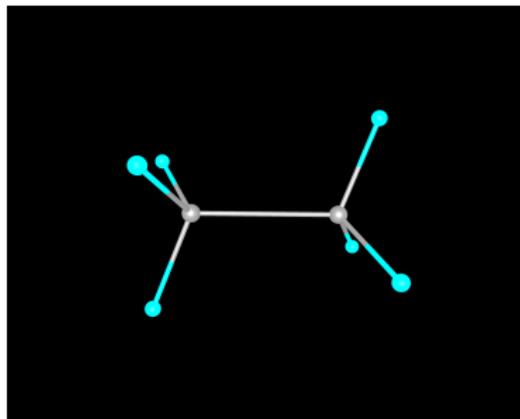
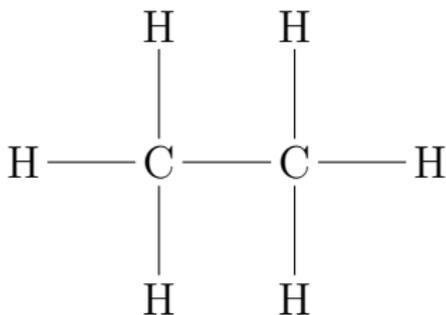
- Nomenclatura.
- Grupos funcionales.
- Estereoquímica.
- Mecanismos de las reacciones orgánicas.
- Hidrocarburos alifáticos y aromáticos.
- Alcoholes.
- Aldehídos y cetonas.
- Ácidos carboxílicos.
- Compuestos orgánicos con nitrógeno.
- Compuestos orgánicos halogenados.
- Polímeros orgánicos.

Convenio de notación



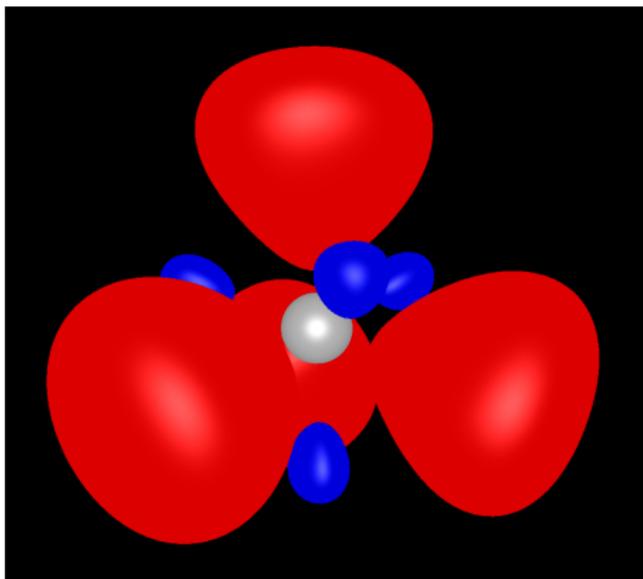
Tipos de enlace carbono-carbono: enlaces simples

- Enlaces simples (un par de electrones): una raya simple.



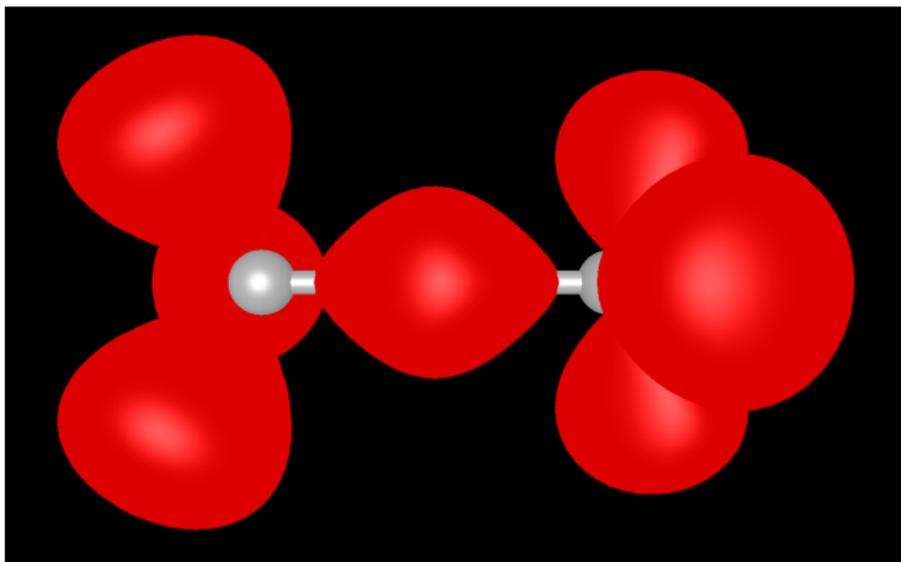
Tipos de enlace carbono-carbono: enlaces simples

Híbridos sp^3



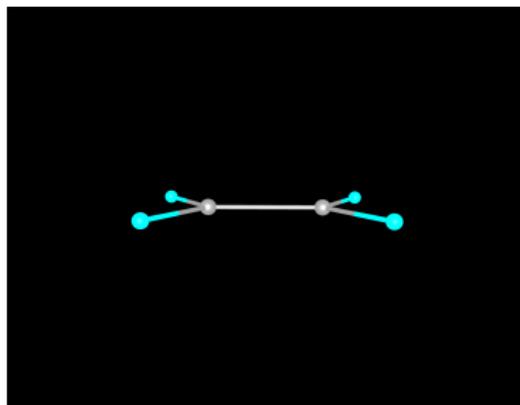
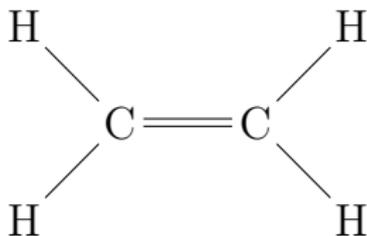
Tipos de enlace carbono-carbono: enlaces simples

Híbridos sp^3 en la molécula de etano



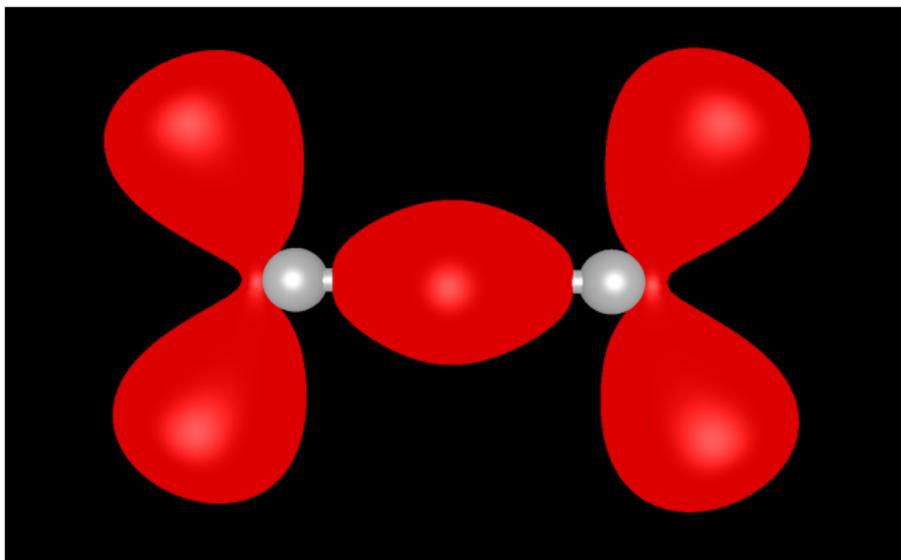
Tipos de enlace carbono-carbono: enlaces dobles

- Enlaces dobles (dos pares de electrones): una raya doble.
- El fragmento es **localmente** plano.



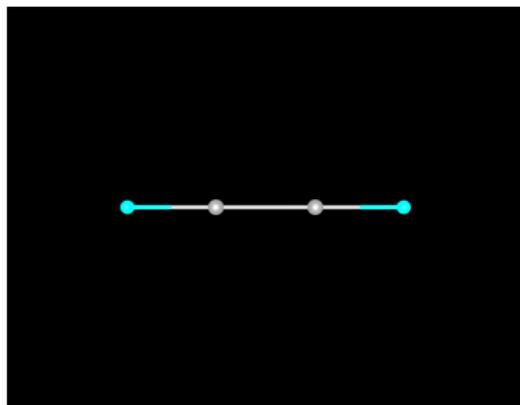
Tipos de enlace carbono-carbono: enlaces dobles

Híbridos sp^2 en la molécula de eteno



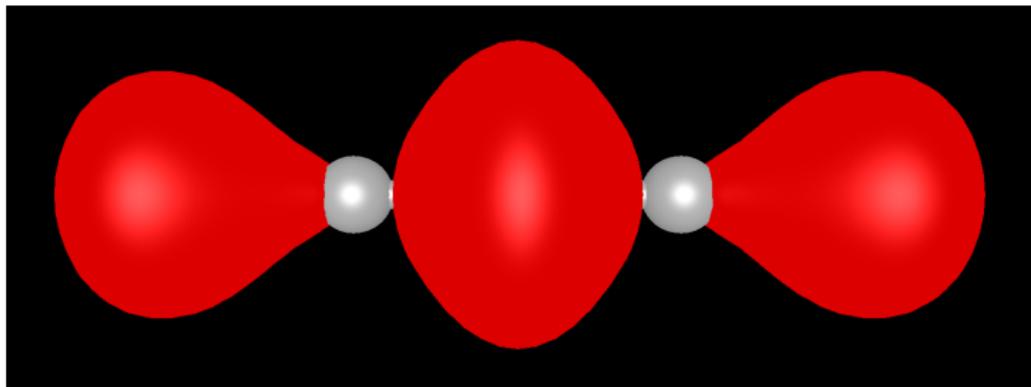
Tipos de enlace carbono-carbono: enlaces triples

- Enlaces triples (tres pares de electrones): una raya triple.
- El fragmento es **localmente** lineal.



Tipos de enlace carbono-carbono: enlaces triples

Híbridos sp en la molécula de acetileno

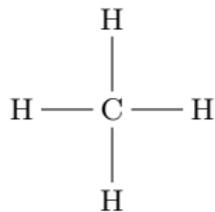


Hidrocarburos saturados

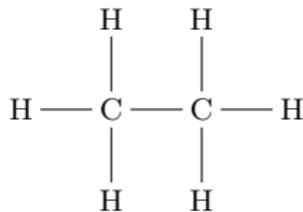
- Están formados solo por carbono e hidrógeno.
- Su fórmula molecular es C_nH_{2n+2} si son lineales y C_nH_{2n} si son cíclicos.
- Su nombre se construye a partir de una raíz que depende del número de carbonos y de la terminación **ano**. P. ej. metano, etano, propano, butano.
- Si son ciclos, se antepone el prefijo **ciclo**. P. ej. ciclopropano, ciclopentano, ciclohexano.
- En los ciclos se suele omitir los hidrógenos.
- **No** son moléculas planas.

Hydrocarbons saturated: examples

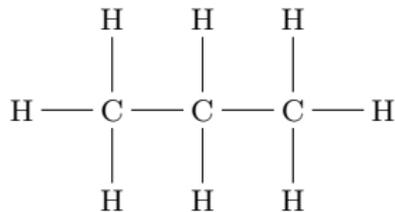
metano



etano



propano



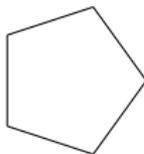
ciclopropano



ciclobutano



ciclopentano



ciclohexano

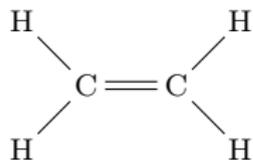


Hidrocarburos insaturados: alquenos

- Están formados solo por carbono e hidrógeno.
- Contienen uno o varios enlaces carbono-carbono dobles.
- Su nombre se construye a partir de una raíz que depende del número de carbonos y de la terminación **eno**. P. ej. eteno, propeno.
- En los casos en que el doble enlace pueda estar en más de una posición no equivalente, se indica la posición con el índice del átomo de C más próximo a un extremo de la cadena. P.ej. 1-buteno, 2-buteno.
- Si son ciclos, se antepone el prefijo **ciclo**. P. ej. ciclopropeno, ciclopenteno, ciclohexeno.
- Si hay más de un doble enlace, se antepone un prefijo que indica el número de dobles enlaces (**di-**, **tri-**, **tetra-**, **penta-**), etc. P. ej. 1,3-pentadieno
- Son *localmente* planos (los átomo de carbono que forman el doble enlace y los átomos unidos a ellos están en un mismo plano).

Alquenos: ejemplos

eteno



propeno



1-buteno



2-buteno



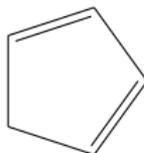
1,3-butadieno



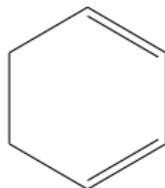
ciclobuteno



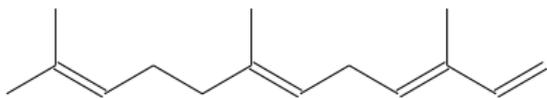
ciclopentadieno



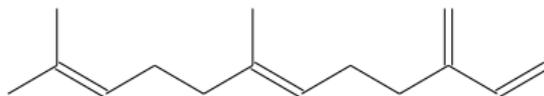
ciclohexa-1,3-dieno



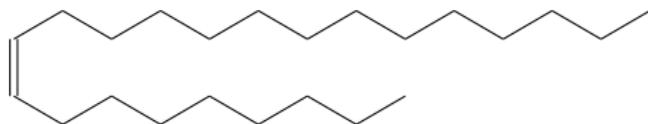
Alquenos: ejemplos de alquenos naturales



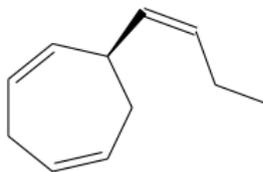
α -farneseno
(piel de la manzana: olor de las manzanas verdes)



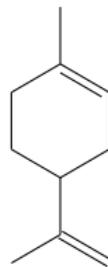
β -farneseno
(feromona de los áfidos (pulgones))



Z-9-tricoseno
(feromona de la mosca común)



ectocarpeno
(feromona de algas)



limoneno
(olor de los cítricos)

Hidrocarburos insaturados: alquinos

- Están formados solo por carbono e hidrógeno.
- Contienen uno o varios enlaces carbono-carbono triples.
- Su nombre se construye a partir de una raíz que depende del número de carbonos y de la terminación **ino**. P. ej. etino, propino.
- En los casos en que el triple enlace pueda estar en más de una posición no equivalente, se indica la posición con el índice del átomo de C más próximo a un extremo de la cadena. P.ej. 1-butino, 2-butino.
- Si son ciclos, se antepone el prefijo **ciclo**. P. ej. ciclooctino.
- Si hay más de un doble enlace, se antepone un prefijo que indica el número de triples enlaces (**di-**, **tri-**, **tetra-**, **penta-**), etc. P. ej. 1,3-pentadiino
- No forman ciclos pequeños estables.
- Son *localmente* lineales (los átomo de carbono que forman el triple enlace y los átomos unidos a ellos están alineados).

Alquinos: ejemplos

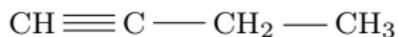
etino
(acetileno)



propino



1-butino



2-butino



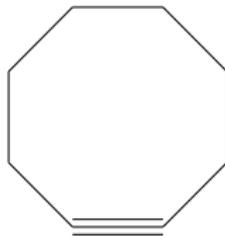
1,3-butadiino



4-octen-1-ino

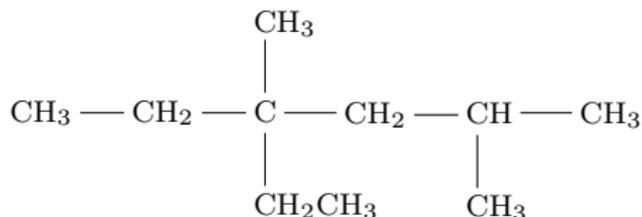


ciclooctino



Hidrocarburos con cadenas ramificadas

- Los hidrocarburos no cíclicos vistos antes se denominan **de cadena lineal**: constan de una única cadena.
- Si en un hidrocarburo lineal se sustituye uno o más hidrógenos no terminales por otras cadenas se obtienen los hidrocarburos de cadena ramificada.
- Ejemplo:



- Para la nomenclatura, consultar:
<http://www.acienciasgalilei.com/qui/pdf-qui/iupac-form-organica.pdf>

Radicales de hidrocarburos

- Los radicales resultan de eliminar un hidrógeno del hidrocarburo correspondiente.
- Se nombran como el hidrocarburo pero con la terminación **ilo**.

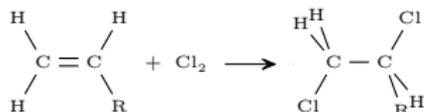
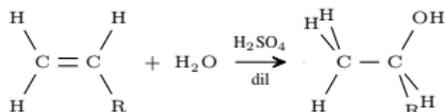
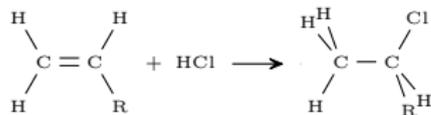
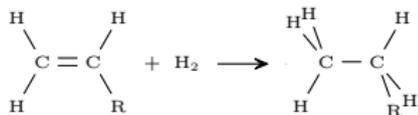
CH_3-	metilo	CH_3CH_2-	etilo
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2-$	propilo	$\text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_3$	isopropilo
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \diagdown \\ \text{CH}-\text{CH}_2- \\ \diagup \\ \text{CH}_3 \end{array}$	isobutilo	$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CH}_2 \\ \diagdown \\ \text{CH}- \\ \diagup \\ \text{CH}_3 \end{array}$	<i>sec</i> -butilo
$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	<i>terc</i> -butilo	$\text{CH}_2=\text{CH}-$	vinilo
$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-$	alilo	$\text{CH}\equiv\text{C}-$	etinilo

Algunas propiedades de los hidrocarburos: temperatura de ebullición

Alcano	T/°C	Alqueno	T/°C	Alquino	T/°C
metano	-162	–	–	–	–
etano	-89	eteno	-104	etino	-57
propano	-42	propeno	-48	propino	-23
butano	0	1-buteno	-6	1-butino	8
pentano	36	1-penteno	30	1-pentino	40
hexano	68	1-hexeno	63	1-hexino	71

Algunas propiedades de los hidrocarburos: reactividad

- Los alcanos son especies poco reactivas. Las principales reacciones son de halogenación (sustitución de uno o varios hidrógenos por átomos de halógenos, por vía fotoquímica o mediante calor) y de combustión.
- Los alquenos dan reacciones de adición al doble enlace. P. ej.:



- **Regla de Markovnikov:** en la adición de haluros de hidrógeno a alquenos, el halógeno va al carbono más sustituido.
- Los alquinos dan reacciones de adición al triple enlace similares a las de los alquenos. Los productos finales pueden contener dobles enlaces o enlaces simples dependiendo de las condiciones de reacción.

Haloalcanos (haluros de alquilo)

- Son moléculas que resultan de la sustitución de uno o varios hidrógenos de un hidrocarburo por átomos de halógenos (F, Cl, Br, I).
- Se nombran como los hidrocarburos ramificados, pero sustituyendo los nombres de los radicales por los correspondientes nombres de los halógenos.
- También se pueden nombrar como haluros de alquilo, alquenoilo, alquinoilo, etc, aunque solo suele hacerse con los más sencillos.

CH_3Cl	clorometano	cloruro de metilo
$\text{CH}_2\text{Cl} - \text{CH}_3$	cloroetano	cloruro de etilo
$\text{CH}_2\text{Cl} - \text{CH}_2\text{Cl}$	1,2-dicloroetano	dicloruro de etileno
$\text{CHCl}_2 - \text{CH}_3$	1,1-dicloroetano	dicloruro de etilideno
CHCl_3	tricloro metano	tricloruro de metilo
$\text{CHCl} = \text{CH}_2$	cloroeteno	cloruro de vinilo
$\text{CH} \equiv \text{C} - \text{CH}_2\text{Cl}$	3-cloro-1-propino	cloruro de propargilo

Algunas propiedades de los haloalcanos

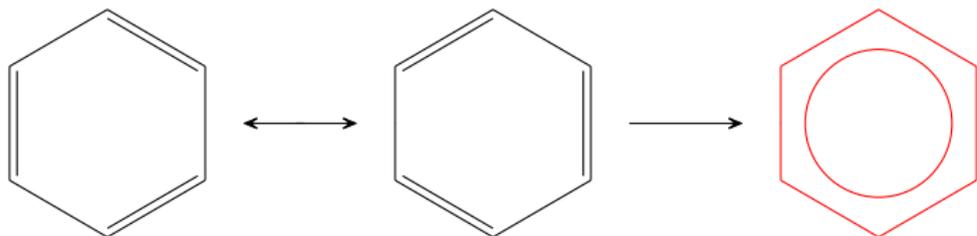
- Son más densos que el agua.
- Son poco solubles en agua.
- Son solubles en medios hidrocarbonados.
- En muchos casos son moléculas polares.
- Tienen temperaturas de ebullición considerablemente mayores que los alcanos de que proceden.

Momentos dipolares y temperaturas de ebullición algunos alcanos y sus haloalcanos

Compuesto	μ/D	T/°C	Compuesto	μ/D	T/°C
CH ₄	0	-161.5	CH ₃ CH ₃	0	-89
CH ₃ F	1.85	-74.8	CH ₃ CH ₂ F	1.94	-38
CH ₃ Cl	1.87	-24	CH ₃ CH ₂ Cl	2.05	12.3
CH ₃ Br	1.81	3.6	CH ₃ CH ₂ Br	2.03	38.4
CH ₃ I	1.62	42	CH ₃ CH ₂ I	1.91	72
Compuesto	μ/D	T/°C	Compuesto	μ/D	T/°C
CH ₃ CH ₂ CH ₃	0	-42	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₃	0	-1
CH ₃ CH ₂ CH ₂ F	2.05	-3	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ F	-	32
CH ₃ CH ₂ CH ₂ Cl	2.05	46.7	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ Cl	2.05	78.5
CH ₃ CH ₂ CH ₂ Br	2.18	71	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ Br	2.08	101.4
CH ₃ CH ₂ CH ₂ I	2.04	102	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ I	2.12	130

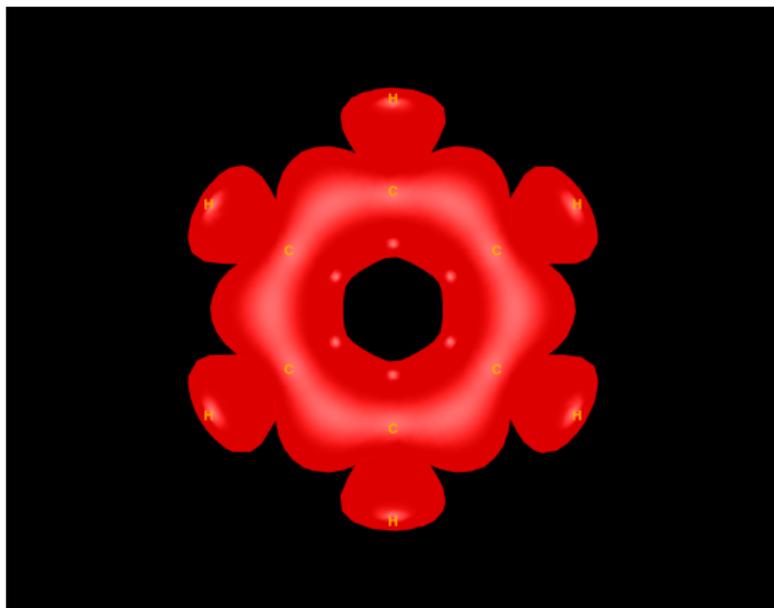
Aromaticidad: el benceno

- La presencia de dobles enlaces conjugados da lugar a estabilidades adicionales, especialmente en el caso de ciertas moléculas cíclicas.
- La molécula de benceno (C_6H_6): es el paradigma de sistema aromático.
- El radical del benceno se denomina **fenilo**.
- Los radicales de hidrocarburos aromáticos se denominan **arilos**.



Aromaticidad: el benceno

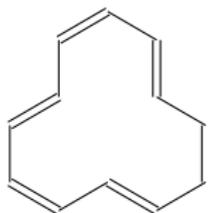
- Deformación de la nube electrónica en el benceno (cota 0.001 bohr^{-3}):



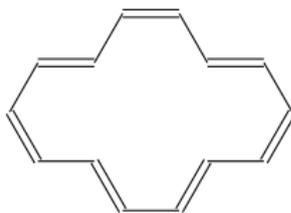
Regla de aromaticidad de Hückel

- Son aromáticos los ciclos de carbono cuyo número de electrones π es $4n + 2$, con $n = 1, 2, 3, \dots$

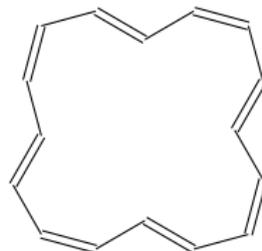
No aromático



Aromático

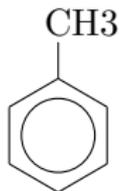


No aromático



Hidrocarburos aromáticos: ejemplos

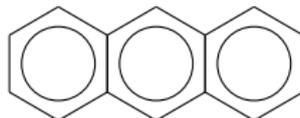
Tolueno



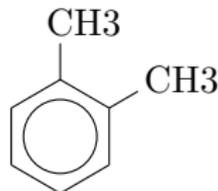
Naftaleno



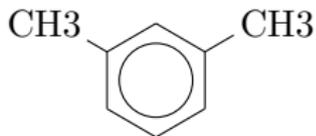
Antraceno



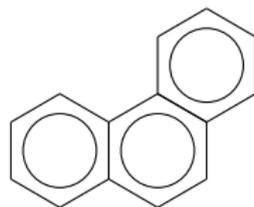
o-Xileno



m-Xileno

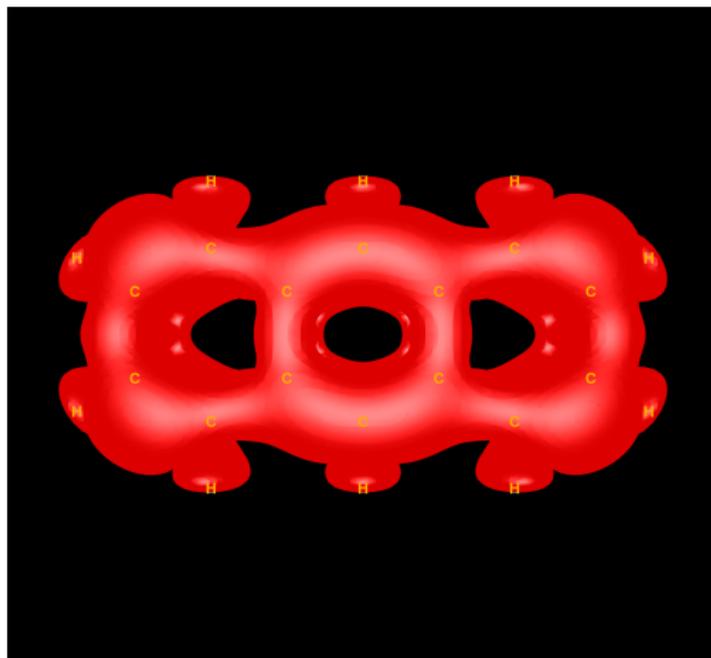


Fenantreno



Nube electrónica del antraceno

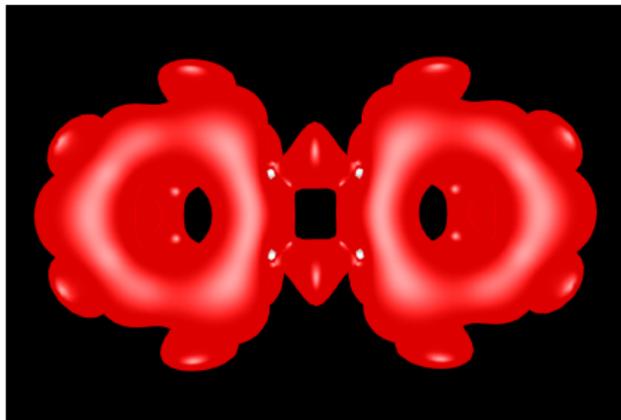
- Deformación de la nube electrónica en el antraceno (cota 0.001 bohr^{-3}):



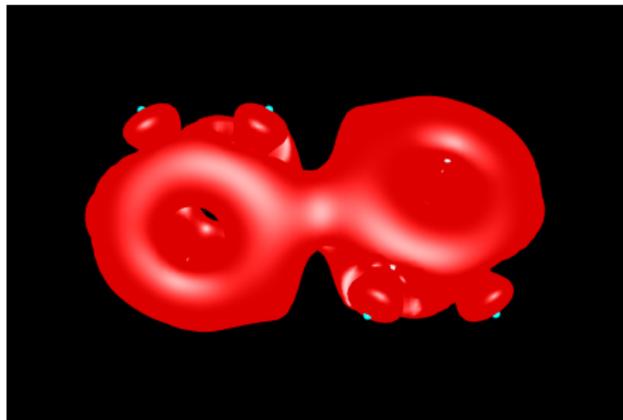
Nubes electrónicas del difenileno y el bifenilo

- Deformaciones de las nubes electrónicas en el difenileno y en el bifenilo (cota 0.001 bohr^{-3}):

Difenileno

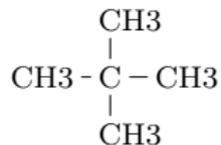
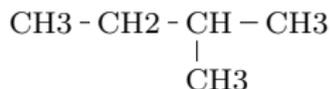


Bifenilo



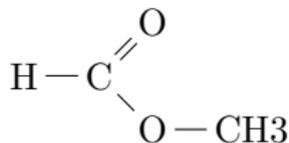
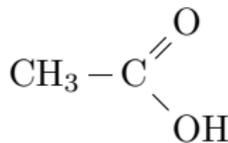
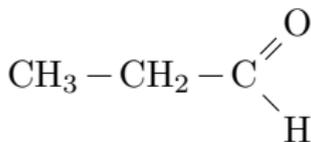
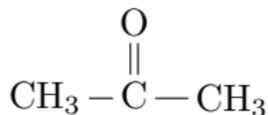
Isomería de esqueleto

- **Isómeros:** moléculas diferentes con la misma fórmula molecular.
- Isómeros de **esqueleto** o de **cadena**: difieren en las conexiones entre cadenas hidrocarbonadas. P. ej. *n*-pentano, metil-butano, 1,2-dimetil propano:



Isomería de función

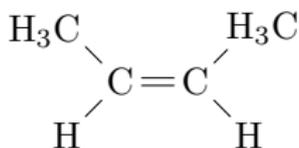
- Isómeros de **función**: distintas ordenaciones que dan lugar a grupos funcionales diferentes.



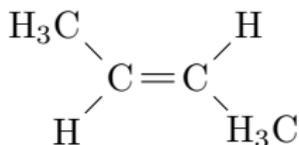
Isomería cis-trans (Z-E)

- Estereoisómeros: moléculas con la misma conectividad en los átomos pero diferente disposición espacial.
- Isomería **cis-trans**: propia de alquenos y de alcanos cíclicos.
- Isomería Z-E: generalización de los conceptos *cis* y *trans* a los casos en que hay tres o más sustituyentes implicados.

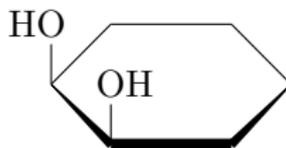
cis 2-buteno (Z)



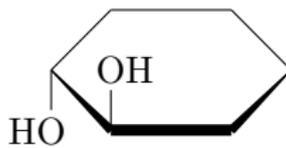
trans 2-buteno (E)



cis 1,2-ciclohexanodiol (Z)



trans 1,2-ciclohexanodiol (E)

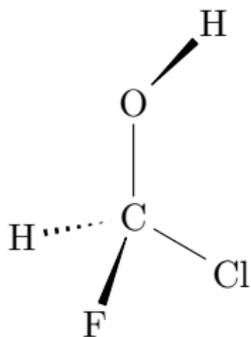


Quiralidad

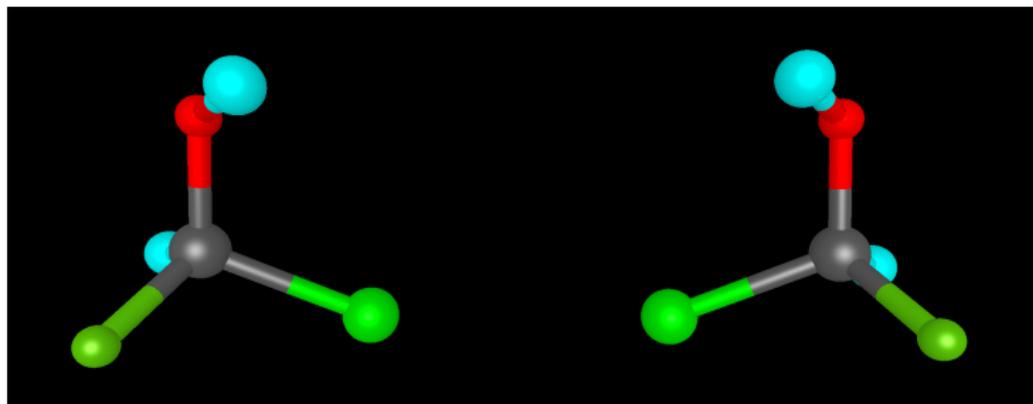
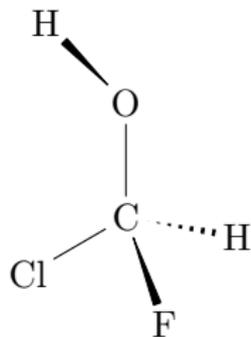
- Carbono **quiral**: aquel que está unido a cuatro sustituyentes distintos.
- La quiralidad va unida a la actividad óptica y da lugar a la existencia de **isómeros ópticos** o **enantiómeros**.
- La mezcla de enantiómeros en proporciones iguales se denomina **mezcla racémica** o **racémico**.
- A diferencia de los enantiómeros, la mezcla racémica no tiene actividad óptica.
- Para distinguir los isómeros ópticos se utiliza el sistema debido a Cahn, Ingold y Prelog.
- También existe quiralidad en los alenos sustituidos.

Isomería óptica: enantiómeros

R



S

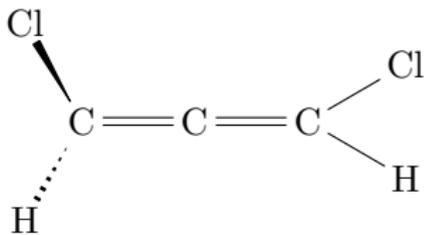


Reglas de Cahn, Ingold y Prelog

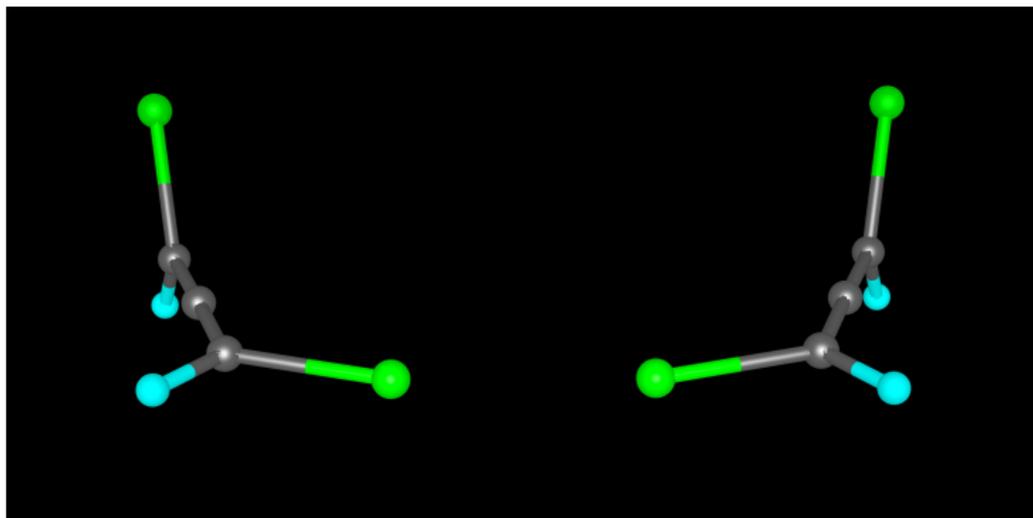
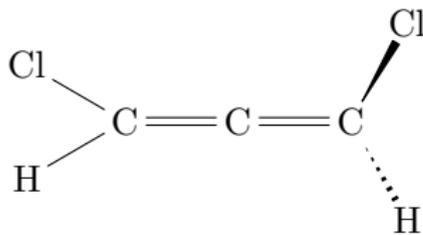
- 1 Se asignan prioridades a los grupos unidos al carbono quiral.
- 2 Mayor prioridad (índice 1) para el átomo unido directamente al carbono con mayor número atómico.
- 3 Menor prioridad (índice 4) para el de menor número atómico.
- 4 El resto de las prioridades se asigna consecutivamente con el criterio anterior.
- 5 En caso de igualdad de número atómico, se mira el siguiente átomo de la cadena y se aplican las reglas anteriores.
- 6 Se sitúa el sustituyente de menor prioridad alejado del observador.
- 7 Se recorren consecutivamente los índices de los tres grupos restantes girando alrededor del eje que pasa por el carbono quiral y el del índice 4.
- 8 Si el recorrido se hace según el sentido de la agujas del reloj el isómero se designa como **R** (rectus).
- 9 Si el recorrido se hace en sentido contrario a las agujas del reloj, como **S** (sinister).

Quiralidad en alenos

R_a



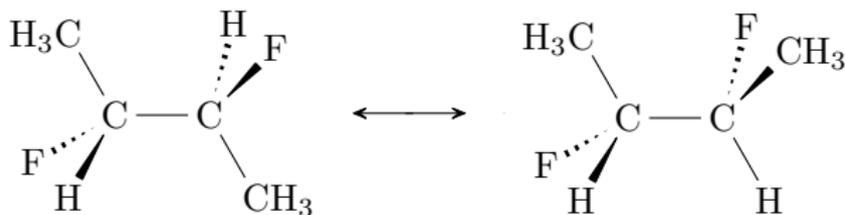
S_a



Confórmeros

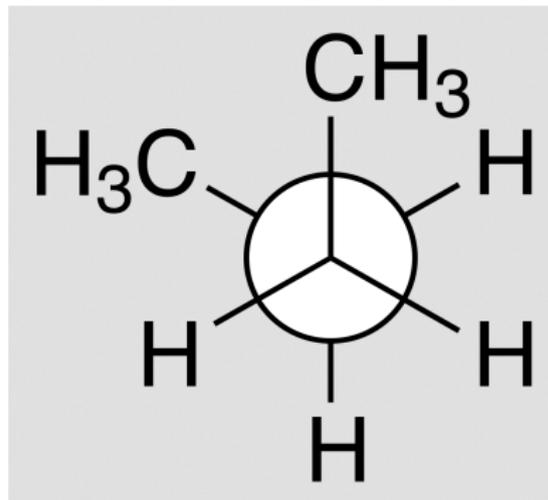
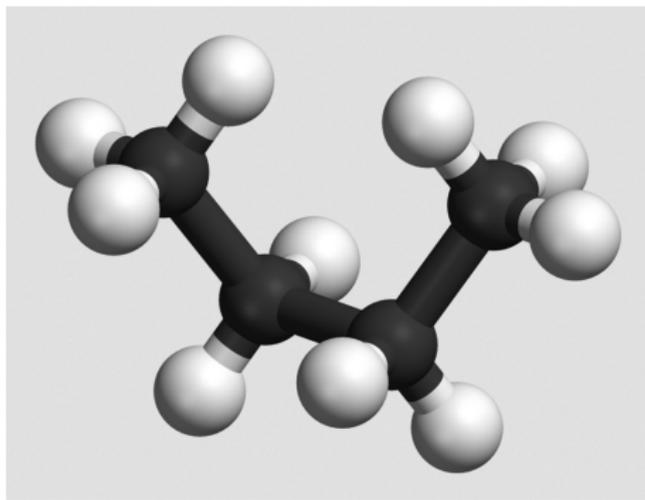
- Los isómeros vistos antes tienen barreras de separación relativamente altas o muy altas ($> 100 \text{ kJ mol}^{-1}$): el paso de unos a otros implica la rotura de algún enlace o la disminución del orden de enlace.
- En los **confórmeros** (o **isómeros conformacionales**) la separación es energéticamente significativamente inferior ($\sim 10 \text{ kJ mol}^{-1}$).
- Los confórmeros suelen transformarse unos en otros por rotaciones parciales alrededor de enlaces simples.
- A temperaturas no muy bajas (p. ej. temperatura ambiente) los confórmeros se convierten entre sí, por lo que no es posible separarlos físicamente.
- Existen casos de barreras conformacionales altas, ligados a interacciones entre sustituyentes (p.ej. enlaces de hidrógeno, puentes disulfuro, impedimentos estéricos). En esos casos es posible la separación.

Conformeros: ejemplos



Conformeros: proyecciones de Newman

- Proyección de Newman del butano a lo largo del eje entre los carbonos 2 y 3.



Conformaciones del butano.

