*QUÍMICA GENERAL

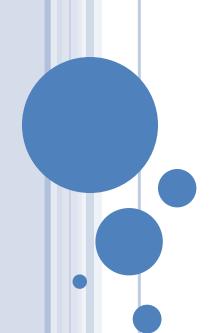


2020

TEMA 3 FUNDAMENTOS DE QUÍMICA ORGÁNICA

- El carbono y sus enlaces.
- Hidrocarburos saturados y no saturados: alcanos, alquenos y alquinos. Hidrocarburos aromáticos.
- Grupos funcionales: alcohol, aldehído, cetona, ácido carboxílico. Éteres y ésteres. Aminas y amidas.
- Análisis cualitativo orgánico.
- o Compuestos heterocíclicos.
- o Estereoquímica.

*EL CARBONO Y SUS ENLACES.



BREVE REVISIÓN HISTÓRICA

Jöns Jacob von Berzelius (1807): introdujo el término química orgánica para estudiar los compuestos derivados de recursos naturales. Afirmó que sustancias orgánicas no podían formarse en el laboratorio, sólo podían producirse en tejidos vivos. Se creía que los compuestos relacionados con la vida poseían una "fuerza vital" que los hacía distintos a los compuestos inorgánicos.

Friedrich Wölher (1828): observó al evaporar una disolución de cianato de amonio, la formación de unos cristales incoloros de gran tamaño, cuyo análisis determinó que se trataba de urea. La transformación observada por Wöhler convierte un compuesto inorgánico, cianato de amonio, en un compuesto orgánico, la urea, aislada en orina de los animales. Este experimento fue la confirmación experimental de que los compuestos orgánicos también pueden sintetizarse en el laboratorio.

Breve Revisión Histórica

Friedrich August Kekulé von Stradonitz (1857 - 1858): definió a la química orgánica simplemente como la química de los compuestos del carbono y desarrolló la Teoría de la Estructura Química basada en dos nociones: la tetravalencia del carbono (los átomos de carbono tiene cuatro electrones en su última capa, así pueden formar cuatro enlaces con otros átomos) y la capacidad de sus átomos de formar enlaces entre ellos para la determinación del orden de enlace entre todos los átomos de una molécula.

QUÍMICA ORGÁNICA

 Es la rama de la química que estudia la estructura, propiedades, síntesis y reactividad de compuestos químicos formados principalmente por carbono e hidrógeno, los cuales pueden contener otros elementos, en pequeña cantidad como oxígeno, azufre, nitrógeno, halógenos, fósforo, silicio.

ELEMENTOS IMPORTANTES EN ORGÁNICA

Carbono Hidrógeno Oxígeno Nitrógeno

Azufre Fósforo Hierro Flúor

Yodo Magnesio Molibdeno Cloro

 El hidrógeno, carbono, nitrógeno y oxígeno constituyen el 99,33 % de todos los átomos que forman los compuestos orgánicos.

CARACTERÍSTICAS DE LOS COMPUESTOS ORGÁNICOS

- Composición → Carbono e hidrógeno;
 también oxígeno y nitrógeno, además de otros.
- Carácter covalente → Gaseosos, líquidos o sólidos; no conductores; solubles en disolventes no polares.
- Combustibilidad → Facilidad de combustión
 ⇒ CO₂ y H₂O.
- Abundancia → El número de compuestos orgánicos naturales y sintéticos conocidos en la actualidad sobrepasa los diez millones debido a la facilidad de su síntesis.

DIFERENCIAS

Propiedades	Orgánicos	Inorgánicos
Fuentes	Se extraen de materias primas que se encuentran en la naturaleza, de origen animal o vegetal, o por síntesis orgánica	Se encuentran libres en la naturaleza en forma de sales, óxidos
Elementos	Básicos: C, H Ocasionales: O, N, S, y halógenos Trazas: Fe, Co, P, Ca, Zn, Mg, Mo	Todos los elementos de la tabla periódica
Enlace predominante	Covalente	Iónico, algunas veces covalente
Estado Físico	Gases, líquidos o sólidos	Son generalmente sólidos
Reacciones	Lentas y rara vez cuantitativas	Instantáneas y cuantitativas
Volatilidad	Volátiles	No volátiles
Puntos de fusión	Bajos: 300° C	Altos: 700° C
Solubilidad en agua	No solubles	Solubles
Solubilidad en solventes orgánicos	Solubles	No solubles

CARACTERÍSTICAS DEL CARBONO

• Z = 6.

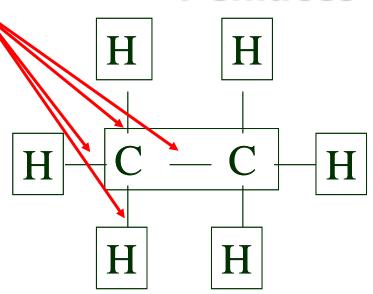
Configuración electrónica 1s² 2s² 2p².

• Tiene 4 electrones de valencia.

 En los compuestos orgánicos, el carbono forma exclusivamente 4 enlaces

covalentes.





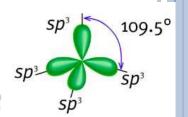
HIBRIDACIÓN

- En química, se conoce como hibridación a la combinación de orbitales atómicos dentro de un átomo para formar nuevos orbitales híbridos.
- Los orbitales atómicos híbridos son los que se superponen en la formación de los enlaces, dentro de la teoría del enlace de valencia y justifican la geometría molecular.

HIBRIDACIÓN DEL CARBONO

- Consiste en un reacomodamiento de electrones del mismo nivel de energía del orbital s al orbital p de la misma capa energética.
- Los orbitales híbridos explican la forma en que se disponen los electrones en la formación de los enlaces.
- Así se pueden combinar orbitales s y p para aumentar el número de enlaces.

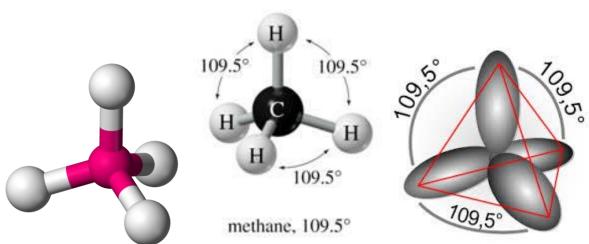
CARACTERÍSTICAS DEL CARBONO. ENLACE SIMPLE

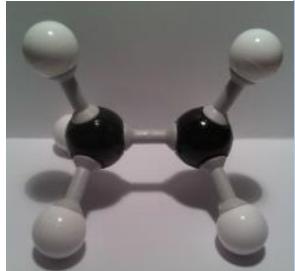


• Se hibrida el **orbital 2s con los 3 orbitales 2p** para formar **4 nuevos orbitales híbridos**llamados **sp**³. Los cuatro enlaces están dirigidos hacia los **vértices de un tetraedro**.

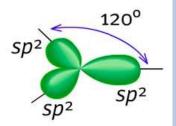
• Las cuatro valencias del carbono e hallan formando entre sí ángulos de 109° 5′ y, además equidistan una de otra

además equidistan una de otra.

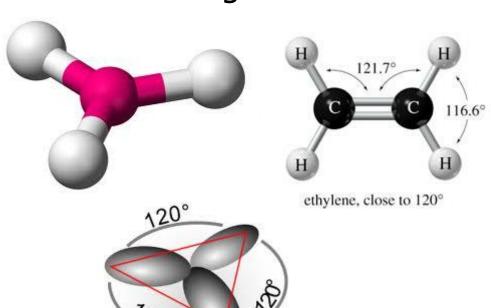




CARACTERÍSTICAS DEL CARBONO. ENLACE DOBLE

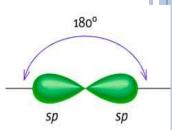


• Se hibrida el **orbital 2s sólo con 2 orbitales 2p**, obteniéndose así **3 orbitales híbridos sp²**, que se disponen hacia los **vértices de un triángulo equilátero**, formando ángulos de 120º entre ellos.

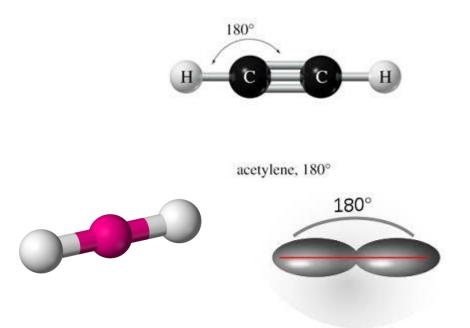




CARACTERÍSTICAS DEL CARBONO. ENLACE TRIPLE



Se hibrida el orbital 2s con un sólo orbital
 2p, obteniéndose así 2 orbitales híbridos
 sp, que se disponen en forma lineal,
 formando un ángulo de 180º entre ellos.





RESUMIENDO

Tipos de Hibridación	sp	sp ²	sp³
Orbitales Implicados	1 OA s + 1 OA p	1 OA s + 2 OA p	1 OA s + 3 OA p
Orbitales Resultantes	2 OH sp 2 OA p	3 OH sp2 1 OA p	4 OH sp3
Geometría	Lineal	Trigonal plana	Tetraédrica
Ángulos	180°	120°	109° 5′
Enlaces	Triple	Doble	Simple
Orbitales Híbridos	sp	sp ²	sp ³ sp ³

REPRESENTACIÓN DE MOLÉCULAS ORGÁNICAS

• Fórmula Molecular o Empírica: indica el número y tipo de átomos presentes en el compuesto, pero no informa los enlaces que presenta el mismo.

Ejemplo: $C_2H_6O \rightarrow etanol$

• Fórmula Semidesarrollada o Condensada: indica únicamente los enlaces de la cadena carbonada (enlaces C-C, C=C ó C≡C) que existen en la molécula con indicación del grupo funcional existente (es la más utilizada en Química Orgánica). Ejemplo: CH₃ − CH₂OH → etanol

REPRESENTACIÓN DE MOLÉCULAS ORGÁNICAS

• Fórmula Desarrollada o Estructural: indica todos los átomos y enlaces covalentes que existen en la molécula pero sin considerar la distribución espacial de los átomos que la conforman.

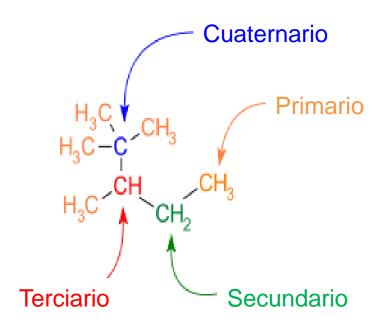
Ejemplo:
$$H H$$

 $H-C-C-OH \rightarrow etanol$
 $H H$

• Fórmula Simplificada: indica las cadenas carbonadas representadas mediante una línea en las que no se indican carbonos e hidrógeno pero si dobles y triples enlaces, átomos diferentes del carbono o hidrógeno y grupos funcionales.

TIPOS DE CARBONOS

- <u>Carbono Primario:</u> cuando solo esta unido a un átomo de carbono.
- <u>Carbono Secundario</u>: cuando esta unido a dos átomos de carbono.
- <u>Carbono Terciario:</u> cuando esta unido a tres átomos de carbono.
- Carbono Cuaternario: cuando esta unido a cuatro átomos de carbono



CARACTERÍSTICAS DE LOS COMPUESTOS ORGÁNICOS

Las moléculas orgánicas pueden ser:

- cadenas lineales^(1, 4) o ramificadas⁽³⁾,
- ser cadenas abiertas^(1, 3, 4) o cíclicas ^(5, 6),
- saturadas (1, 3, 5) o insaturadas (4, 6), y
- ser carbocíclicos (5, 6) o heterocíclicos (2).

CLASIFICACIÓN DE COMPUESTOS ORGÁNICOS

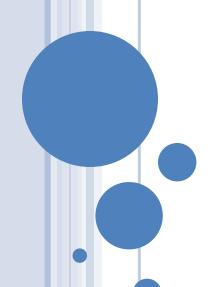
- Los compuestos orgánicos se han clasificado con base a un conjunto de átomos (grupo funcional) que los caracterizan y del cual dependen en gran medida sus propiedades físicas y químicas.
- ➤ En base a esta clasificación se presentan las distintas familias.

Familia	Fórmula General
Alcanos	R-H
Alquenos	R-C=C-R
Alquinos	R-C≡C-R
Alcoholes	R-OH
Aldehídos	R-C-H O
Cetonas	R-C-R O

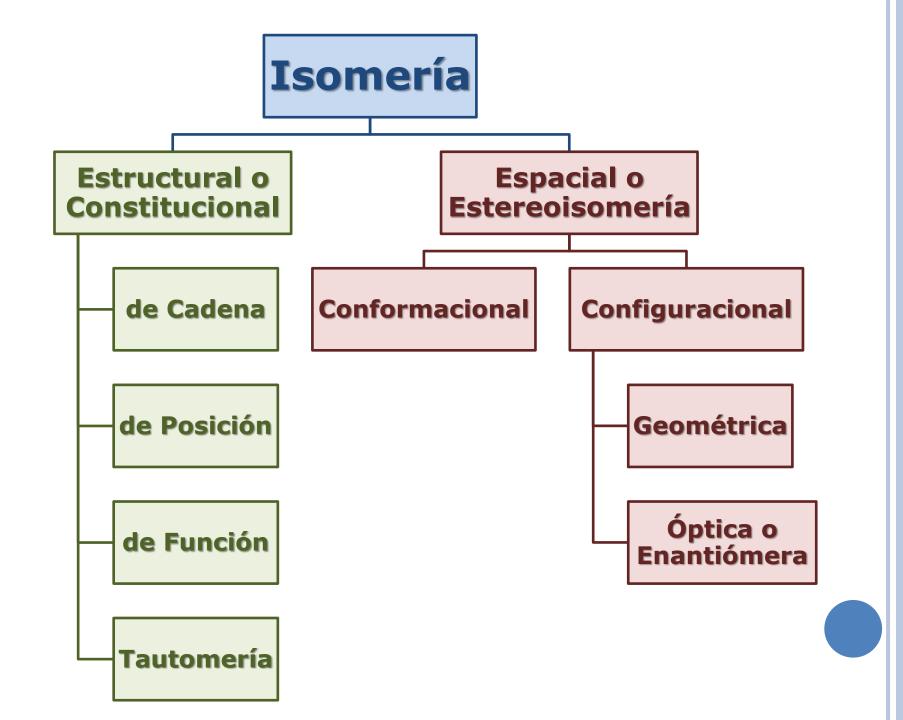
Familia	Fórmula General
Éteres	R-O-R
Ácidos carboxílicos	R-C-OH O
Ésteres	R-C-O-R
Amidas	R-C-NH ₂
Aminas	R-NH ₂

*ISOMERÍA.

* ESTEREOQUÍMICA.



- Cuando dos o más compuestos tienen fórmulas moleculares idénticas, pero diferentes fórmulas estructurales, se dice que cada uno de ellos es isómero de los demás, y al fenómeno de su coexistencia se le denomina isomería.
- Los isómeros son compuestos que poseen la misma fórmula molecular, pero diferente fórmula desarrollada. Por lo tanto las sustancias presentan diferentes propiedades físico químicas.



La **Isomería Estructural** se debe a diferencias de estructura, es decir **varían en el ordenamiento de los átomos de carbono** y puede explicarse mediante fórmulas planas.

La **Estereoisomería** la presentan sustancias que con la misma estructura tienen una diferente distribución espacial de sus átomos.

ISOMERÍA CONSTITUCIONAL

- Los isómeros constitucionales tienen la misma fórmula molecular, pero difieren en la forma de unir los átomos.
- En general, poseen propiedades químicas y físicas diferentes que permiten separarlos sin dificultad.

Isomería de Cadena

Es la que presentan las sustancias cuyas fórmulas estructurales difieren únicamente en la disposición de los átomos de carbono en el esqueleto carbonado.

Isómeros con fórmula molecular C ₄ H ₁₀	
CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₃	CH ₃ I CH ₃ —CH—CH ₃
n- butano	2- metilpropano (iso butano)

Isomería de Posición

Es la que presentan sustancias cuyas fórmulas estructurales difieren únicamente en la posición de su grupo funcional o en la posición de la ramificación sobre el esqueleto carbonado.

Isómeros con fórmula molecular C₃H ₈	
CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ OH	CH₃−CH−CH₃ OH
1- propanol	2- propanol

Isomería de Función

Es la que presentan sustancias que con la misma fórmula molecular presentan distinto grupo funcional.

Isómeros con fórmula molecular C ₂ H ₆ O	
CH ₃ -CH ₂ OH	CH ₃ -O-CH ₃
Alcohol Etílico	Dimetil Éter

I. de cadena	CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₃ (C ₄ H ₁₀)	CH ₃ -CH-CH ₃ CH ₃ (C ₄ H ₁₀)
II. de posición	CH_3 - CH_2 - CO - CH_3 ($C_5H_{10}O$)	CH_3 - CH_2 - CO - CH_2 - CH_3 ($C_5H_{10}O$)
III. de función	CH ₃ -CH ₂ -COOH (C ₃ H ₆ O ₂)	CH ₃ -COO-CH ₃ (C ₃ H ₆ O ₂)

TAUTOMERÍA

- > Son isómeros constitucionales de fácil interconversión por encontrarse entre sí en rápido equilibrio.
- > Tautómeros (del griego, tauto=igual y meros=parte) se denominan dos isómeros que se diferencian sólo en la posición de un grupo funcional.
- ➤ Entre las dos formas existe un equilibrio químico. En un equilibrio tautomérico hay migración de un grupo o átomo.

forma *enólica* (alcohol insaturado)

forma ceto

ISOMERÍA ESPACIAL

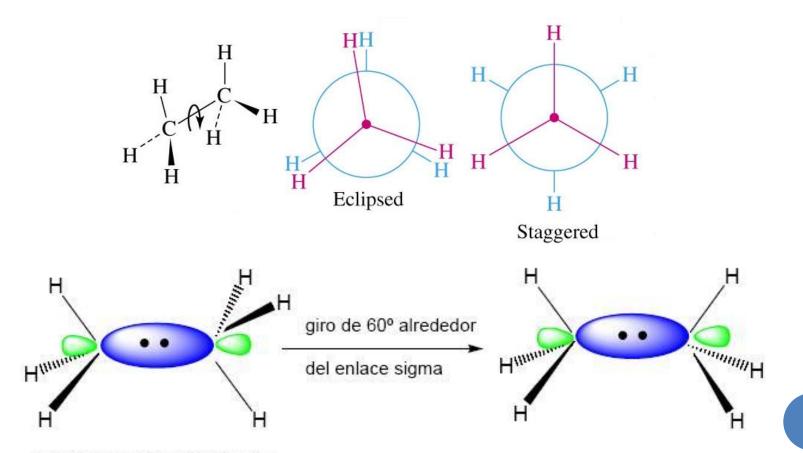
Los estereoisómeros, además de tener la misma fórmula molecular, tienen todos los enlaces idénticos y poseen el mismo ordenamiento de los átomos, se diferencian por la disposición espacial de los grupos.

Isomería Conformacional

- Moléculas con la misma fórmula estructural que tienen formas diferentes debido a las rotaciones sobre uno o más enlaces.
- ➤ Reciben el nombre de conformaciones de una molécula las diversas disposiciones de sus átomos en el espacio transformables unas en otras por rotación en torno a sus enlaces sencillos.
- Las conformaciones diferentes pueden tener distintas energías, por lo general se pueden convertir internamente confacilidad, y son muy raramente aislables.

Isomería Conformacional

> Etano, dos conformaciones extremas:

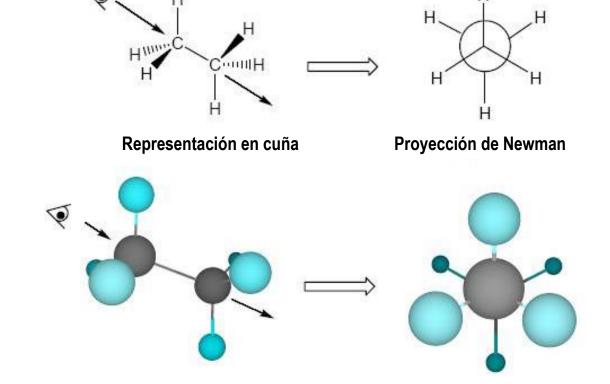


conformación alternada del etano

conformación eclipsada del etano

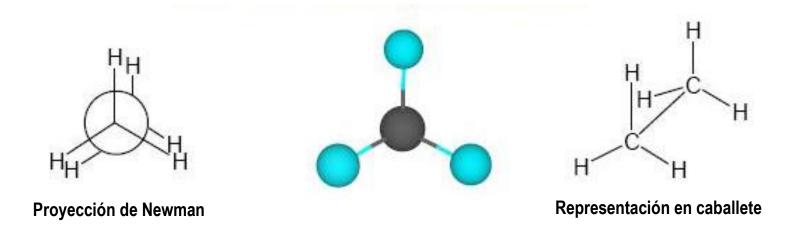
Isomería Conformacional

Conformación Alternada del Etano (más estable)

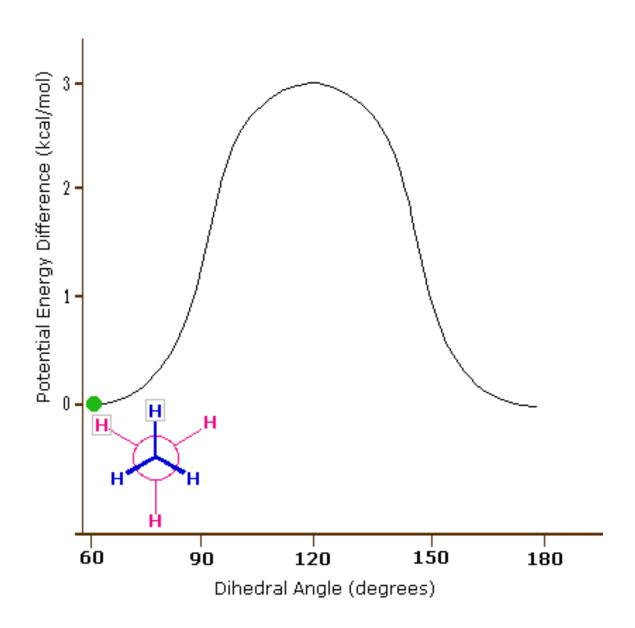


Isomería Conformacional

Conformación Eclipsada del Etano (menor estabilidad)



Existen conformación Sesgadas que son todas las formas intermedias que existen entre la conformación eclipsada y alternada.



ISOMERÍA CONFIGURACIONAL

- Moléculas con la misma fórmula estructural que tienen diferentes configuraciones.
- No basta una simple rotación para convertir una forma en otra y aunque la disposición espacial es la misma, los isómeros no son interconvertibles.
- Los isómeros configuracionales son aislables, ya que es necesaria una gran cantidad de energía para interconvertirlos (se requiere energía necesaria para la ruptura de enlaces).

ISOMERÍA GEOMÉTRICA

- La estereoisomería cis-trans está habitualmente ligada a la presencia de dobles enlaces porque la rotación alrededor del doble enlace está restringida, manteniendo los sustituyentes posiciones fijas respecto a los otros.
- > Si los sustituyentes en un carbono del doble enlace son los mismos, entonces no existirá este tipo de isomería.

ISOMERÍA GEOMÉTRICA

Los estereoisómeros ligados al doble enlace se notan como **cis** (en latín, de este lado) o **trans** (del latín, cruzado), en referencia a la posición relativa de los sustituyentes a cada lado de un doble enlace.

Isómeros con fórmula molecular C ₄ H ₆ O ₂	
H ₃ C COOH	H ₃ C H COOH
Forma Cis	Forma Trans

Isomería Geométrica

> TRANS:

Más estable Menor contenido energético Menor reactividad

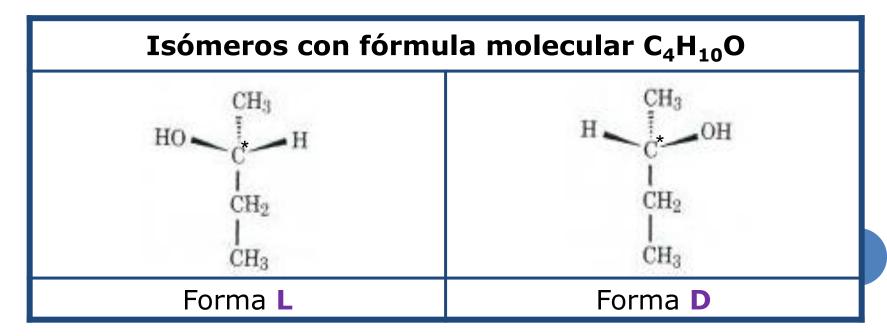
> CIS:

Menos estable Mayor contenido energético Mayor reactividad

El término quiralidad (o disimetría molecular) en griego significa mano. Cuando una molécula o cualquier objeto se califica de quiral se quiere indicar que su simetría es similar a la de una mano, es decir, no es idéntica a su imagen especular.

Los enantiómeros son estereoisómeros que se relacionan entre sí por una reflexión: son imágenes especulares entre sí, y no son superponibles.

Es característica de sustancias que **presentan un carbono asimétrico o quiral** (C*), que es un átomo de carbono que está enlazado con cuatro elementos o grupos de átomos diferentes.



- Dos compuestos que son enantiómeros entre sí tienen las **mismas propiedades físicas**, a excepción de la dirección en que giran la luz polarizada.
- ➤ También tienen las **mismas propiedades químicas**, excepto el modo en que interactúan con diferentes isómeros ópticos de otros compuestos.
- La única propiedad que diferencia a una pareja de enantiómeros es la **actividad óptica** y pueden ser separados sólo con el uso de un agente quiral.

- En la naturaleza, sólo está presente uno de los dos enantiómeros de la mayoría de los compuestos biológicos quirales (el isómero D o el L). Por ejemplos, en los glúcidos los isómeros más abundantes son los D, mientras que en los aminoácidos predominan los L.
- Como resultado, los diferentes enantiómeros de un compuesto pueden tener efectos biológicos distintos.

Importancia de la enantioselectividad en los medicamentos

S-Thalidomide

(teratogenic)

R-Thalidomide

(sleep-inducing)

MLES DE NÍÑOS NACEN CON MALFORMACIONES POB CULPA DE LA TALIDOMIDIA. Se evendia como un direntado unilegenose y ha anchado pare aer el constanza de militar de distracto frances. La taliforniale, que salár a la venta con distractada for manada de militar en distracto de la besigna sinúrica. La ingustión inicial de lander ou la venta de servicia a trapedia que conserva à fundas de la decada para distracto for el servicia a trapedia que conserva à fundas de la decada para de conserva de fundas de la decada para decada de la decada para decada decada de la decada para

La **talidomida** es un fármaco que fue comercializado entre los años 1958 y 1963 como sedante y como calmante de las náuseas durante los tres primeros meses de embarazo. Posee dos enantiómeros: la forma R (que producía el efecto sedante que se buscaba) y la S (que producía efectos teratogénicos). Este descubrimiento produjo que a partir de ese momento se tuviese en cuenta la Estereoisomería en moléculas, utilizando el sistema R/S actual.

Ejercicios:

1.- Los siguientes pares de compuestos son isómeros constitucionales o estructurales. Defina, en cada caso, si la isomería corresponde a una de cadena, de posición o de función:

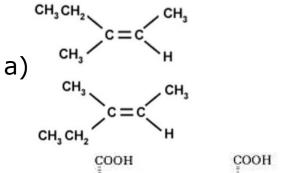
a)
$$CH_3$$
 CH_3 CH_3 - CH_3 CH_3 - CH_3 CH_3 CH_3 CH_3 CH_3 CH_3

$$_{\text{CH}_3-\text{C-O-CH}_3}^{\text{Q}}$$
 b) $_{\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{C-OH}}^{\text{Q}}$ Isómeros de ______

c)
$$_{\rm H_3C-CH=HC-CH_3}^{\rm H_2C=CH-CH_2-CH_3}$$
 Isómeros de _____

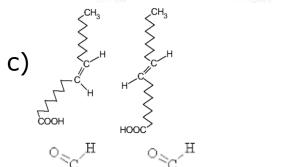
Ejercicios:

2.- Los siguientes pares de compuestos son estereoisómeros o isómeros espaciales. Defina, en cada caso, si la isomería corresponde a una geométrica u óptica:



Isómeros _____

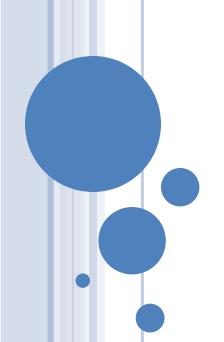
Isómeros _____



Isómeros _____

Isómeros _____





TIPOS DE REACCIONES

Atendiendo a la variación del esqueleto carbonado las reacciones orgánicas suelen clasificarse en:

- Sustitución
- Adición
- Eliminación
- Transposición
- Condensación

TIPOS DE REACCIONES

• Sutitución: un átomo o grupo de átomos existente en una molécula orgánica es sustituido por otro.

Ejemplo: CH_3 -Br + $CN^- \rightarrow CH_3$ -CN + Br Bromuro de metilo Cianuro de metilo

 Adición: se produce la adición de una molécula al enlace múltiple (doble o triple) de otra.

Ejemplo: $CH_2=CH_2 + H-Br \rightarrow H-CH_2-CH_2-Br$ Eteno Bromoetano

• Eliminación: consiste en la pérdida intramolecular de una molécula en el seno de otra con formación de un enlace múltiple.

Ejemplo: $H-CH_2-CH_2-OH \rightarrow CH_2=CH_2 + H_2O$ Etanol Eteno

TIPOS DE REACCIONES

• **Transposición**: es la reestructuración de los átomos de una molécula para originar otra estructura distinta (isomerización).

Ejemplo:
$$CH_3$$
- CH_2 - CH_3 \rightarrow CH_3 - CH - CH_3

Butano

 CH_3

Isobutano

• Condensación: radica en la formación de una molécula a partir de otras dos, por pérdida intermolecular de una molécula de pequeño tamaño, generalmente agua.

Ejemplo: CH_3 -OH + CH_3 -CH₂-OH \rightarrow CH_3 -O- CH_2 -CH₃+ H_2 O metanol etanol metiletiléter

SITIOS REACTIVOS

- ✓ Las reacciones generalmente ocurren en los **sitios reactivos** de las moléculas y los iones. Estos sitios se agrupan principalmente dentro de dos categorías, dando origen a dos tipos de reactivos:
- ☐ Reactivos electrófilos: sustancias que reaccionan buscando electrones.

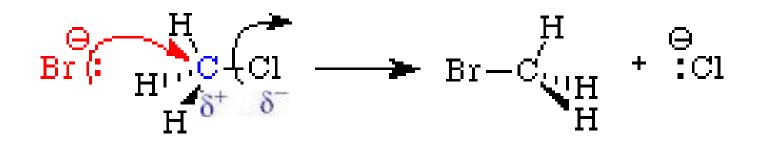
Ácidos y agentes oxidantes son sustancias o especies químicas con apetencia de e-, ya sea para compartirlos (ácidos) o bien para captarlos total o parcialmente (oxidantes).

□ Reactivos nucleófilos: sustancias que reaccionan buscando átomos deficientes en electrones.

Bases y agentes reductores son sustancias o especies químicas que tienden a unirse o a reaccionar con aquellas moléculas o puntos de las mismas en las que hay deficiencias de e- para ceder o compartir los e- que poseen; buscan centros de cargas positiva ("núcleo").

SITIOS REACTIVOS

- ✓ En química un **nucleófilo** (amante de núcleos) es una especie que **reacciona cediendo un par de electrones libres** a otra especie (el electrófilo), combinándose y enlazándose covalentemente con ella. Puede ser un anión o una molécula neutra con un par de electrones libres.
- ✓ Un nucleófilo es también por definición una base de Lewis.
- ✓ Un **electrófilo** es un reactivo que participa en una reacción química **aceptando un par de electrones**, atacando para ello la zona de mayor densidad electrónica del nucleófilo y formando un enlace con él. La mayoría están cargados positivamente, tienen un átomo que lleva una carga positiva parcial o bien no posee un octeto de electrones.
- ✓ Ya que los electrófilos aceptan electrones, ellos son ácidos de Lewis.



ión bromuro clorometano

bromometano ión cloruro

Ejercicios:

1.- Clasifique las siguientes reacciones como sustitución, adición, eliminación, transposición o condensación:

b)
$$R - C_{OH}^{O} + H_{N} - R' \rightarrow R - C_{NH}^{O} + H_{2}O$$
 Reacción de ______

d)
$$_{\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CHBr}-\text{CH}_3} \longrightarrow _{\text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_3} + _{\text{HBr}}$$

Reacción de _____