

Tema 3. Química Orgánica

El término "química orgánica" fue introducido en 1807 por Jöns Jacob Berzelius, para estudiar los compuestos derivados u obtenidos de los seres vivos. Se creía que los compuestos relacionados con la vida poseían una "**fuerza vital**" que les hacía distintos a los compuestos inorgánicos y que por ello era imposible su preparación en el laboratorio.

En 1828, Friedrich Wöhler obtuvo urea, compuesto presente en la orina de los animales, a partir de un compuesto inorgánico. Este experimento fue la confirmación experimental de que los compuestos orgánicos también pueden sintetizarse en el laboratorio y no presentan "nada especial".

La química orgánica estudia la estructura, propiedades, síntesis y re actividad de **compuestos químicos formados principalmente por carbono e hidrógeno**, los cuales pueden contener otros elementos: oxígeno, azufre, nitrógeno, halógenos, fósforo, silicio, etc

Los compuestos orgánicos presentan una enorme variedad en tamaño (desde el metano con un solo átomo de carbono hasta las proteínas o ácidos nucleicos con cientos de miles de átomos de carbono) estructura, propiedades y aplicaciones, tanto los que se encuentran en la naturaleza como los que son sintetizados en el laboratorio. Muchos de ellos forman parte de nosotros: proteínas, ADN, glúcidos, lípidos, etc o están presentes en nuestras vidas, como productos farmacéuticos, plásticos, detergentes, pinturas, explosivos, colorantes, insecticidas.....

¡Son cien millones!

INVESTIGACIÓN Y CIENCIA

Edición española de Scientific American

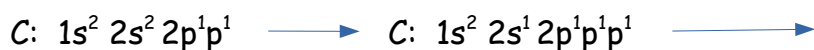
El 23 de junio de 2015 el registro de sustancias del **Chemical Abstract Service** ha llegado a los cien millones. La velocidad a la que se generan nuevas sustancias es de varios miles al día, una cantidad ingente. **La mayoría de esas sustancias registradas son compuestos orgánicos.**

<http://www.quimicaorganica.org>

¿Porque el carbono da lugar a tantos y tan variados compuestos?

Los compuestos orgánicos son MOLECULAS, formados por cadenas de átomos de Carbono unidos ENTRE SÍ POR ENLACE COVALENTE y unidos también a hidrógenos y otros átomos diferentes (*heteroátomos*).

La razón de la formación de cadenas muy variadas está en la estructura electrónica del átomo de carbono: ($1s^2 2s^2 2p^2$), puede formar un total de 4 enlaces con otros átomos, por ejemplo con hidrógenos dando lugar al compuesto: CH_4 , el mas simple.



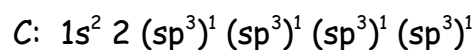
Estado fundamental

Estado excitado

Atomo aislado

2 electrones desapareados

4 electrones desapareados



Estado hibridado

Atomo en una molécula

4 electrones desapareados

Estructura de Lewis del
atomo de carbono



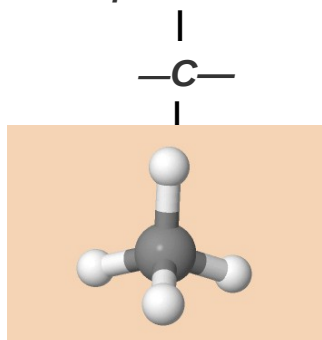
Pero si se enlaza con otros átomos de carbono cada uno de los cuales puede volver a conectarse con otros las posibilidades de obtener estructuras distintas crecen. Además puede unirse también a átomos de otros elementos: O, N, P, S,

♦ LOS ENLACES DEL CARBONO Y SU GEOMETRIA

Un átomo de carbono puede unirse a otros átomos compartiendo un par de electrones (enlace simple), 2 pares de electrones (doble) o 3 pares de electrones (triple).

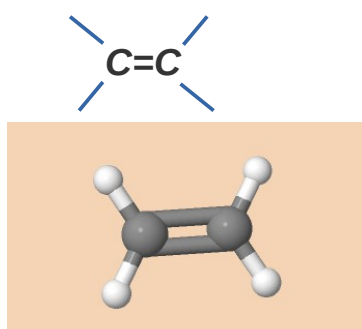
- Cada par de electrones compartidos es un enlace y se representa por : —
- Cada átomo de carbono forma siempre un total de **4 enlaces**

enlace simple o sencillo



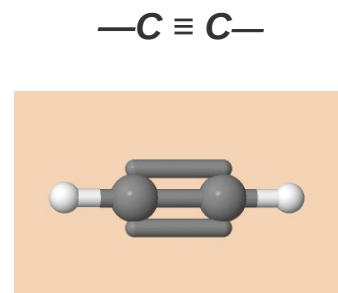
Angulo: 109,5°
Geometría: TETRAEDRICA
Libertad de giro: Si

enlace doble



120°
TRIANGULAR
No

enlace triple



180°
LINEAL

♦ LOS ENLACES DE LOS HETEROÁTOMOS

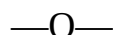
H

1 enlace



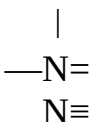
O

2 enlaces



N

3 enlaces



X = F, Cl, Br, I

1 enlace



♦ Formas de escribir un compuesto orgánico en el papel o en una pantalla.

Formular molecular



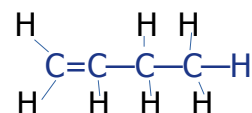
No aporta información de la estructura de la molécula, no se utiliza más que para cálculos numéricos. Además hay varios compuestos distintos con la misma fórmula.

Formula semidesarrollada



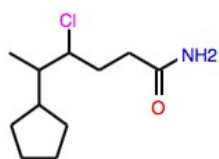
Se agrupan los hidrógenos. Se especifican los enlaces C-C, y con los heteroátomos. Es una forma simplificada de la molécula real, se dibuja en 2D un objeto 3D. Aun así se utiliza mucho.

Formula desarrollada



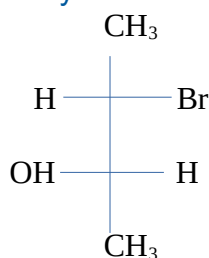
Se especifican todos los enlaces. Puede ser útil para distinguir algunos tipos de isómeros. Inconveniente: ocupa mucho espacio.

Formula de esqueleto.



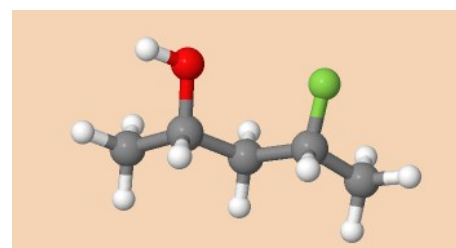
Se representan los enlaces en ángulo simulando la geometría "real". Se omiten los hidrógenos y los carbonos, estos están en cada vértice. Sí se escriben los heteroátomos. Es la más utilizada por los químicos orgánicos.

Proyecciones



Se usan para el estudio de moléculas con centros quirales.

Simulación 3D de bolas y varillas

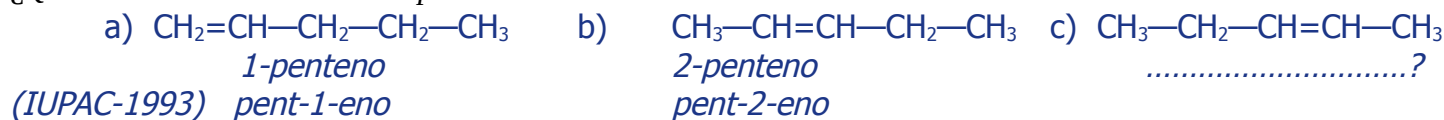


LINEALES O DE CADENA ABIERTA

ALCANOS	ALQUENOS	ALQUINOS
Metano CH_4		
Etano $\text{CH}_3\text{—CH}_3$	Eteno $\text{CH}_2=\text{CH}_2$	Etino $\text{CH}\equiv\text{CH}$
Propano $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_3$	Propeno $\text{CH}_2=\text{CH—CH}_3$	Propino $\text{CH}\equiv\text{C—CH}_3$
Butano $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3$	Buteno $\text{CH}_2=\text{CH—CH}_2\text{—CH}_3$	Butino $\text{CH}\equiv\text{C—CH}_2\text{—CH}_3$
Pentano $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3$	Penteno $\text{CH}_2=\text{CH—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3$	Pentino $\text{CH}\equiv\text{C—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3$
Hexano $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3$	Hexeno $\text{CH}_2=\text{CH—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3$	Hexino $\text{CH}\equiv\text{C—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3$
Heptano $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3$	Hepteno $\text{CH}_2=\text{CH—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3$	Heptino $\text{CH}\equiv\text{C—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3$
Octano $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3$	octeno	octino
Nonano $\text{CH}_3\text{—(CH}_2)_7\text{—CH}_3$	noneno	nonino
Decano	deceno	decino
Undecano	undeceno	undecino

De los nombres de los alcanos deriva la parte del nombre (**sufijo**) de un compuesto orgánico que indica el número de átomos de la cadena principal

¿Que nombre reciben estos compuestos?



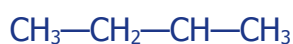
Localizador : numero que señala en que carbono esta el doble enlace (o triple, o rama , o grupo funcional).

La cadena de carbonos debe numerarse de forma que el localizador tenga el numero mas bajo.

Notese que el compuesto c) no es diferente sino que es el compuesto b) girado, y tiene el mismo nombre

Ramificaciones

Metil	– CH ₃
Etil	– CH ₂ —CH ₃
Propil	– CH ₂ —CH ₂ —CH ₃
Butil	– CH ₂ —CH ₂ —CH ₂ —CH ₃
Pentil	– CH ₂ —CH ₂ —CH ₂ —CH ₂ —CH ₃
1-Propenil	–CH=CH—CH ₃



2-metil-butano

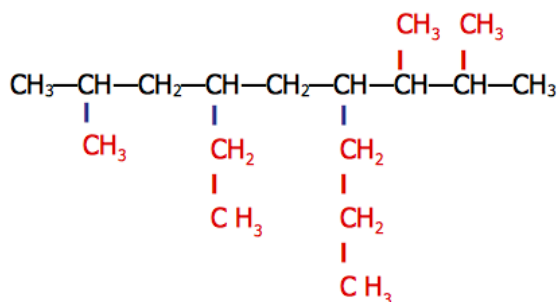


Se nombran a partir del hidrocarburo del que *proviene*
acabados en **-il**

Y se indica el carbono al que se unen con el localizador

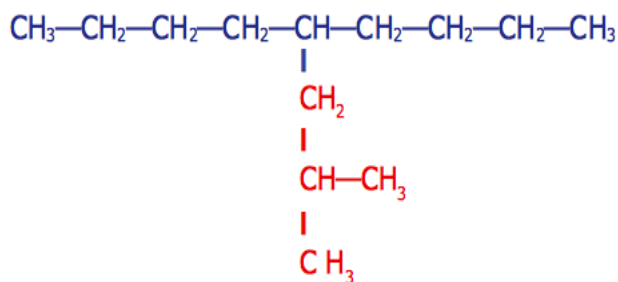
PAUTAS PAR NOMBRAR HIDROCARBUROS

1. Se busca la cadena mas larga
Si hay empate se elige la que tenga mayor numero de ramas
2. Se numera de forma que los localizadores sean el conjunto de números mas bajo posible
Si hay empate prevalece el que alfabéticamente se nombre antes
3. Se nombran las ramas por orden alfabético, se agrupan si hay ramas iguales mediante prefijos **di**, **tri**, **tetra**, **penta**,... (los prefijos no cuentan para el orden alfabetico: **tri**etil va antes que **metil**) y se indican los localizadores con un numero.



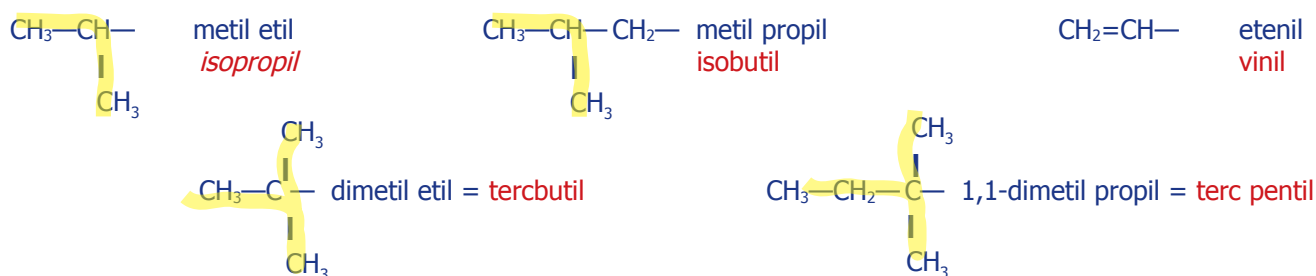
Solucion: Hay dos cadenas de igual longitud (9C), se toma como principal la dibujada en negro pues es la que soporta mas ramas. Se numera por la derecha: (2,3,4,6,8) es menor que (2,4,6,7,8).
6-etil-2,3,8-trimetil-4-propil nonano

Ramas ramificadas



- Se nombra el *hidrocarburo* del que provienen empezando a numerar por el carbono *enganchado* a la cadena principal
En el ejemplo, la rama ramificada, en rojo, provienen del **2- metil propano** → **2-metilpropil**
- Se localiza en la cadena principal y se escribe entre parentesis: **5- (2-metilpropil)nonano**
- Para el orden alfabetico se cuenta la primera letra que aparece aunque sea un prefijo (di,tri...)

Ramificaciones con nombres especiales (no son sistematicos pero estan aceptados y se usan mucho)

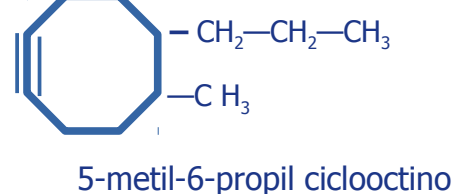
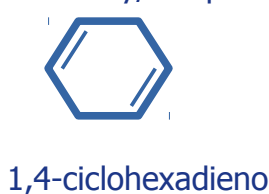
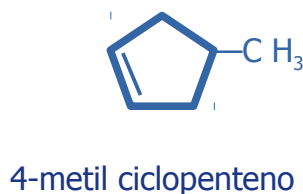


HIDROCARBUROS CÍCLICOS O DE CADENA CERRADA

* Saturados (cicloalcanos)



* Insaturados: con enlaces dobles y/o triples:



HIDROCARBUROS AROMATICOS

Derivados del benceno,

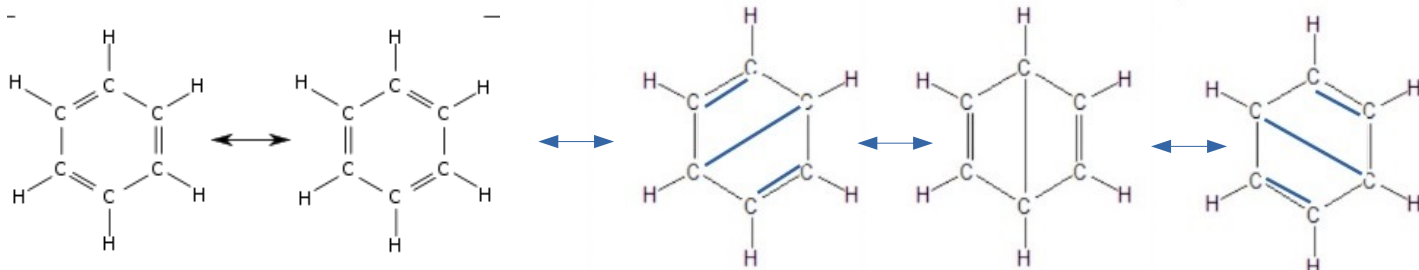
El benceno es un compuesto orgánico de fórmula C_6H_6 . Lo que implica que debe tener varios enlaces dobles y/o triples (4 dobles, 1 triple y 3 dobles, o 2 triples y un doble) si fuese de cadena abierta. Pero esto no se corresponde con las propiedades que presenta el benceno.

Friedrich August Kekulé propuso una solución novedosa para la estructura del benceno: una disposición cíclica de los átomos de carbono formando un hexágono regular, y los dobles enlaces alternados:



Sello alemán de 1964 conmemorativo la estructura del benceno propuesta por Kekulé en 1865.

Poco mas tarde Dewar propuso otras 3 estructuras

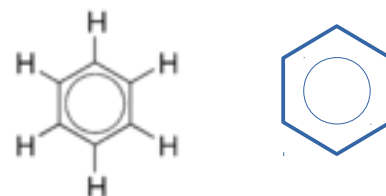


La forma real de la molécula de benceno no se corresponde con ninguna de ellas sino que oscila o resuena entre esas estructuras que se llaman *formas resonantes* o *formas límite*, la molécula es una mezcla simultánea de todas las estructuras, que contribuyen por igual a la estructura electrónica.

La diferencia entre las distintas forma esta unicamente en la posición que ocupan los dobles enlaces, estos no tienen posición fija, cambian continuamente, están deslocalizados.

Para escribir esta situación mediante una única estructura se dibuja un anillo en el hexágono que representa la deslocalización de los electrones a todos los átomos de carbono.

Todos los compuestos (hidrocarburos o de otro tipo) que presentan esta situación se denominan **aromáticos**.

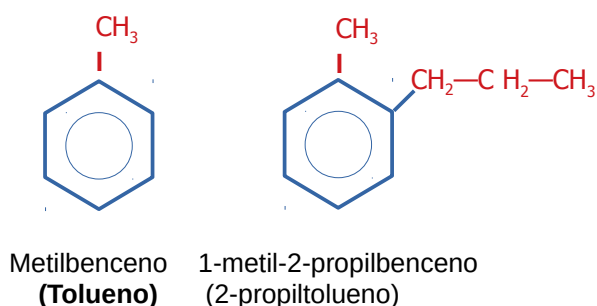


Hidrocarburos derivados del benceno.

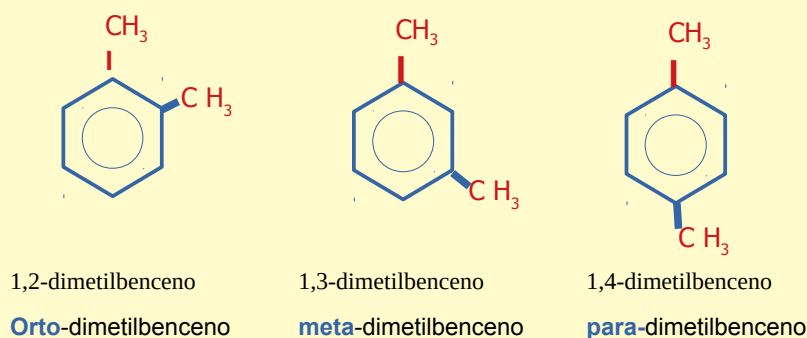
Se pueden sustituir los hidrógenos por ramas.

Se nombran de forma que a las ramas le toquen los números mas bajos.

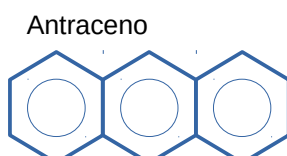
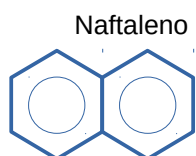
Algunos de estos compuestos conservan los nombres tradicionales y están admitidos.



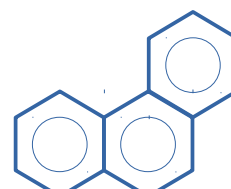
Si el anillo de benceno tiene 2 sustituyentes (iguales o distintos) hay 3 compuestos posibles (isómeros de posición) y se puede usar los prefijos : **orto, meta para**



AROMATICOS CONDENSADOS



Fenantreno



COMPUESTOS OXIGENADOS Y NITROGENADOS

Grupo funcional : átomo o grupo de átomos cuya presencia en una molécula le confiere unas propiedades químicas comunes a todos los compuestos que lo poseen y distintas de los que no lo tienen.

El conjunto de compuestos orgánicos que contienen el mismo grupo funcional constituye una familia de compuestos, ejemplos: alcoholes, ácidos, cetonas, aminas,....

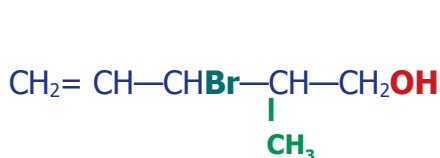
Una **serie homóloga** está constituida por un grupo de compuestos con el mismo grupo funcional y tales que cada término se diferencia del anterior en que posee un grupo $-\text{CH}_2-$ más y cuyas propiedades físicas varían progresivamente a largo de la serie.

Tomaremos como pauta general la Nomenclatura IUPAC **sustitutiva**.

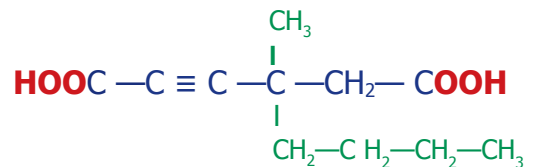
Normas para nombrar ALCOHOLES, ALDEHIDOS, CETONAS, ACIDOS, AMIDAS Y NITRILOS

En general nombre de un compuesto orgánico consta de:

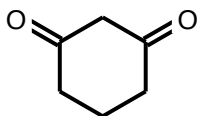
- **prefijo** que indica el numero de átomos de carbono de la cadena principal, o del ciclo o anillo
- **sufijo** correspondiente al **grupo funcional**
- **partículas** que indican enlace simple: **-an** - , doble: **-en-** triple: **-in-**
- **localizadores : números** para los carbonos, o símbolos: N (nitrógeno)
- **prefijos** para agrupar ramas o grupos iguales: **di, tri, tetra**,
- ramas, halógenos y grupos nitro se nombran previamente y por orden alfabético.



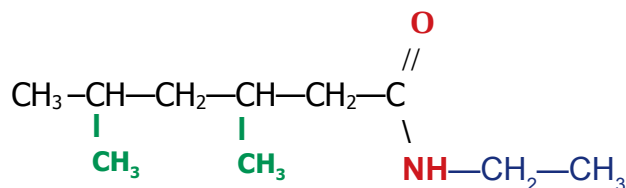
3 - bromo- 2 - metil - 4 - pent en -1- ol
ramas y halogenos 5 atomos doble enlace grupo funcional



ácido 4 - butil- 4 -metil - 2 - hex ino di oico
ramas 6 atomos Triple enlace grupo funcional

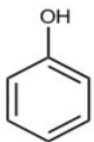


1,3- ciclohexanodiona

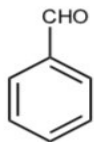


3,5-dimetil-N-etil-hexanamida

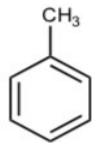
COMPUESTOS AROMATICOS CON NOMBRES PROPIOS



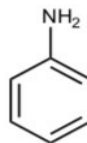
Fenol
hidroxibenceno



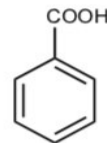
Benzaldehído
bencenocarbaldehído



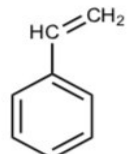
Tolueno
metilbenceno



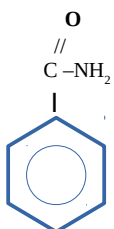
Anilina
fenilamina
bencenoamina



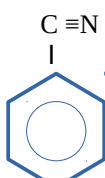
Ac. Benzoico
Acido bencenocarboxílico



Estireno
vinilbenceno
etenilbenceno



Benzamida
bencenoamida



Bencenonitrilo

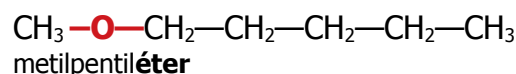
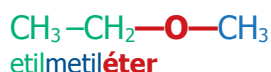
Debajo, en azul, los correspondientes nombres sistemáticos

COMPUESTOS QUE NO SIGUEN LA PAUTA GENERAL (o tienen una forma alternativa para ser nombrados)

ÉTERES — O —

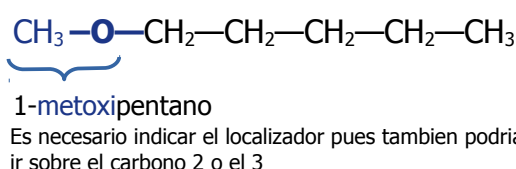
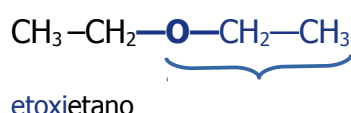
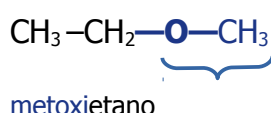
Se pueden nombrar de 2 formas:

1. Nomenclatura IUPAC funcional : se nombran las ramas a las que se une el -O- ordenadas alfabéticamente, terminando con la palabra **éter**.

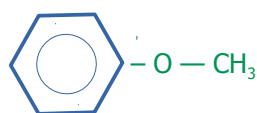


2. Nomenclatura IUPAC sustitutiva.

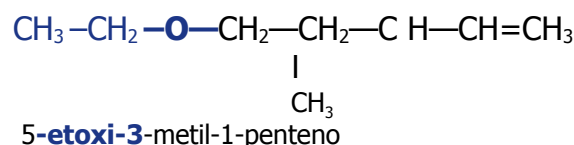
Se nombran como derivados del hidrocarburo : se toma como cadena principal la rama de mayor longitud (o complejidad) y se nombra la otra, que contiene al — O — , como un sustituyente: metoxi, etoxi, propoxi, etc.



La primera forma es más utilizada para éteres sencillos: con ramas cortas, sin ramificaciones o ciclos sencillos
La segunda es más útil para éteres con ramas complejas o ciclos sustituidos:



fenilmetiléter ó
metoxibenceno



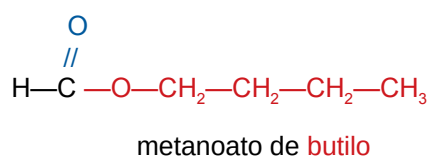
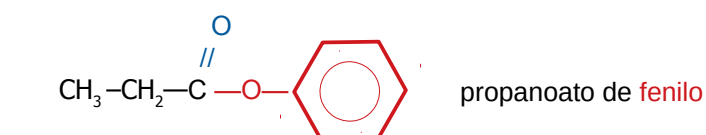
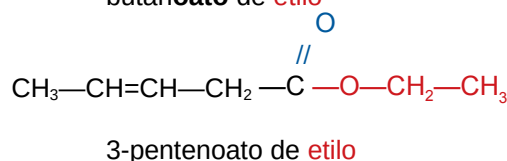
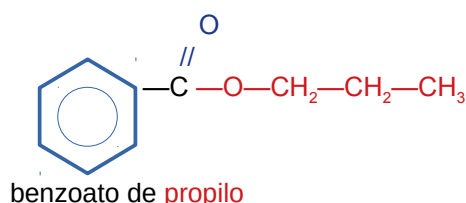
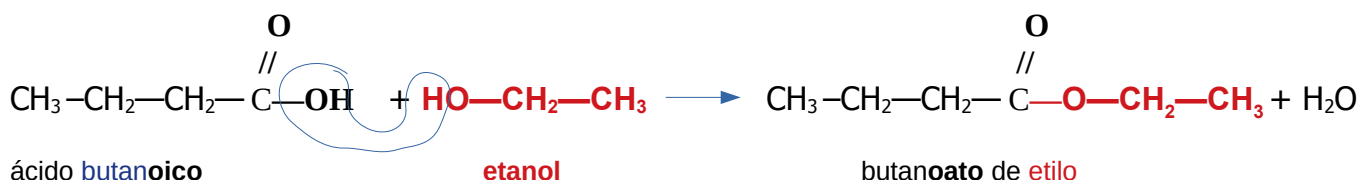
(El enlace doble tiene preferencia para numerar pues el **etoxi** ha pasado a ser una rama y se nombra y numera como tal)

ÉSTERES $\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{C}-\text{O}- \end{array}$

Se obtienen a partir de una reacción de condensación entre un ácido y un alcohol.



El nombre deriva del ácido y el alcohol de procedencia (de forma análoga al nombre de las oxisales)



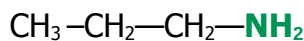
AMINAS

Se pueden considerar derivadas del amoníaco , NH_3 , al que se le han sustituido los H por cadenas de carbono (ramas)

Se pueden clasificar :

→ Atendiendo al numero de ramas unidas al N

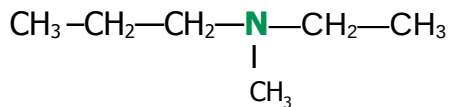
- **Aminas primarias** : solo llevan una rama



- **Aminas secundarias** : 2 ramas



- **Aminas terciarias** : 3 ramas



➔ Atendiendo al numero de veces que aparece el grupo —NH_2 (llamado grupo **amino**)

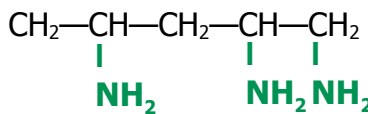
- Monoaminas : 1 grupo amino



- Diaminas : 2 grupos amino



- Triaminas, 3



- ■ ■ ■

Para nombrar, igual que con los éteres, hay 2 formas:

1. Nomenclatura IUPAC funcional : se nombran las ramas a las que se une el **N**, se elige la mas larga terminada en amina, se anteponen las otras ramas ordenadas por orden alfabetico.

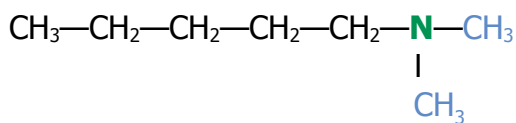
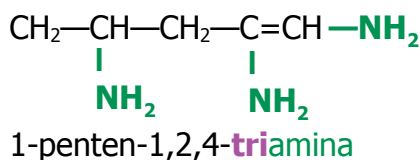
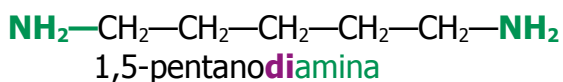
Para indicar que las ramas van unidas al nitrógeno se pone el localizador : **N** (se puede omitir en monaminas sencillas si no lleva a ambigüedad)

- $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—}\overset{\text{CH}_3}{\underset{|}{\text{N}}}\text{—CH}_2\text{—CH}_3$

N-etil-N-metil**propilamina**
ó etilmetilpropilamina

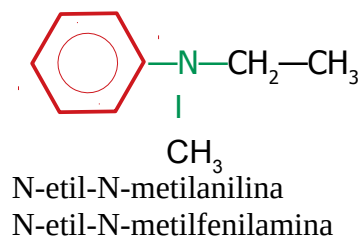
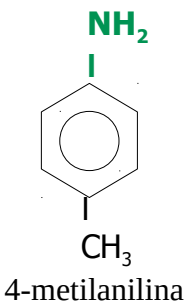
2. Nomenclatura IUPAC sustitutiva.

Se toma como cadena principal la rama de mayor longitud (o complejidad) y se nombra según el número de átomos de carbono y como sufijo, **-amina**, con su localizador y los prefijos multiplicativos, es decir se **sigue la pauta general**.



opción 1: N,N-dimetilpentilamina

opción 2: N,N-dimetil- 1-pentanamina



En general,

* Cualquier compuesto en que todos sus enlaces C-C son simples es SATURADO (posee el mayor número de átomos de hidrógeno posibles)

* Si posee algún enlace doble o triple es INSATURADO (todavía se le pueden añadir átomos de H)

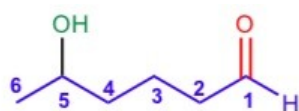
Compuestos con varias funciones

Cuando en un compuesto orgánico existen varias grupos funcionales distintos, se elige como principal aquel que aparece más arriba en la Tabla, es el que tiene preferencia para determinar la cadena más larga y numerarla, y se nombra como **sufijo**

El resto de funciones pasan a ser meros sustituyentes, nombrándose como **prefijos**, ordenados alfabéticamente delante del nombre de la cadena principal. (consultar en la tabla el nombre de cada función cuando es secundaria: *ciano, amino, hidroxilo, oxo*, etc.)

En la tabla de funciones existen ejemplos sencillos.

Otros ejemplos:

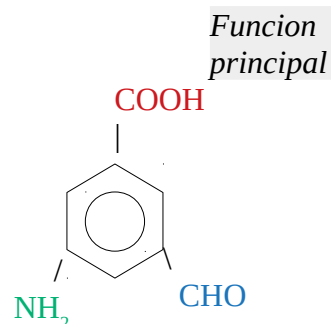


Función Principal: Aldehído (-al)

Cadena principal: hexano

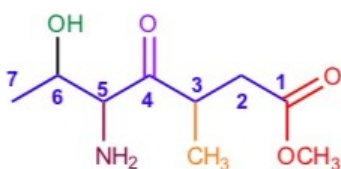
Sustituyente: Alcohol (hidroxilo-)

Nombre: 5-Hidroxihexanal



5-Hidroxihexanal
sustituyente cadena grupo
principal funcional

Acido 3-amino-5-formil benzoico



Función Principal: éster (-oato de metilo)

Cadena principal: heptano

Sustituyentes: alcohol (hidroxilo-) en 6; amina (amino-) en 5; cetona (oxo-) en 4; metilo en 3.

Nombre: 5-Amino-6-hidroxi-3-metil-4-oxoheptanoato de metilo

5-Amino-6-hidroxi-3-metil-4-oxoheptanoato de metilo
sustituyentes ordenados cadena grupo
alfabéticamente principal funcional

Obsérvese la ordenación alfabética de los sustituyentes, independientemente de que sean funciones orgánicas o simples grupos alquilo.