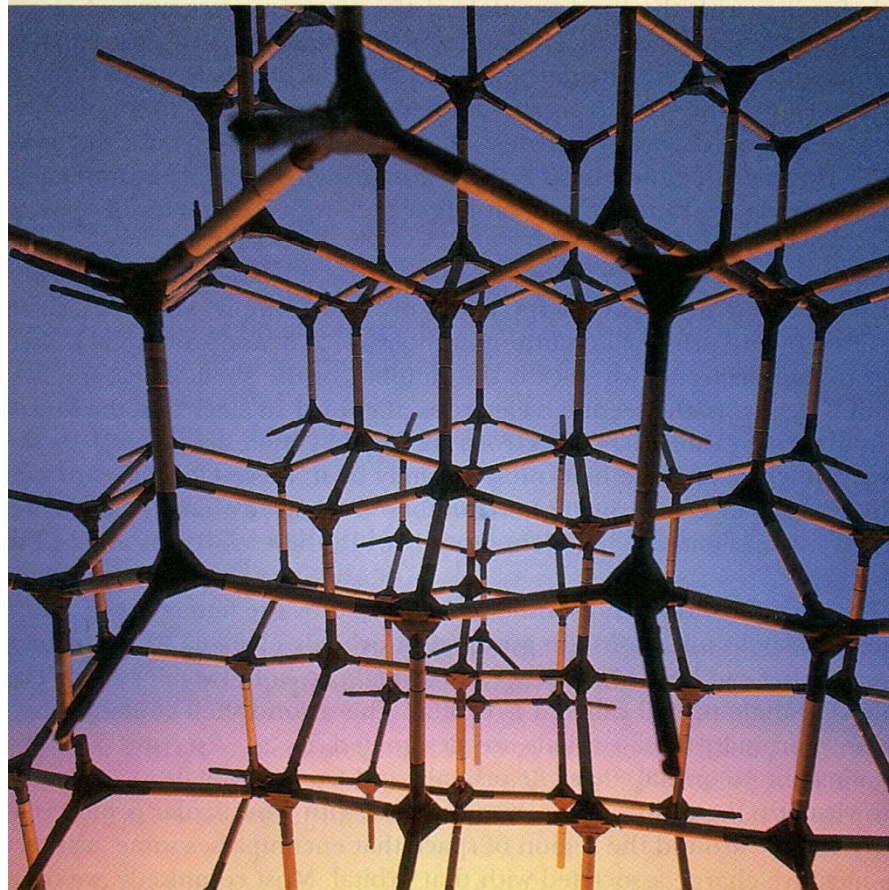


MÓDULO A:

Estructura y propiedades físicas,
ácido-base y espectroscópicas de los
compuestos orgánicos



MÓDULO A:

Estructura y propiedades físicas, ácido-base y espectroscópicas de los compuestos orgánicos

Tema 2. Naturaleza, formulación y nomenclatura de los compuestos orgánicos

Tema 3. Estructura y propiedades de las moléculas orgánicas

Tema 4. Caracterización mediante técnicas instrumentales (I)

Tema 5. Caracterización mediante técnicas instrumentales (II)

Módulo A. Estructura , propiedades físicas, ácido-base y espectroscópicas de los compuestos orgánicos

Tema 2. Naturaleza, formulación y nomenclatura de los compuestos orgánicos

Las imágenes utilizadas para la preparación de este tema proceden de dos libros de Química Orgánica:

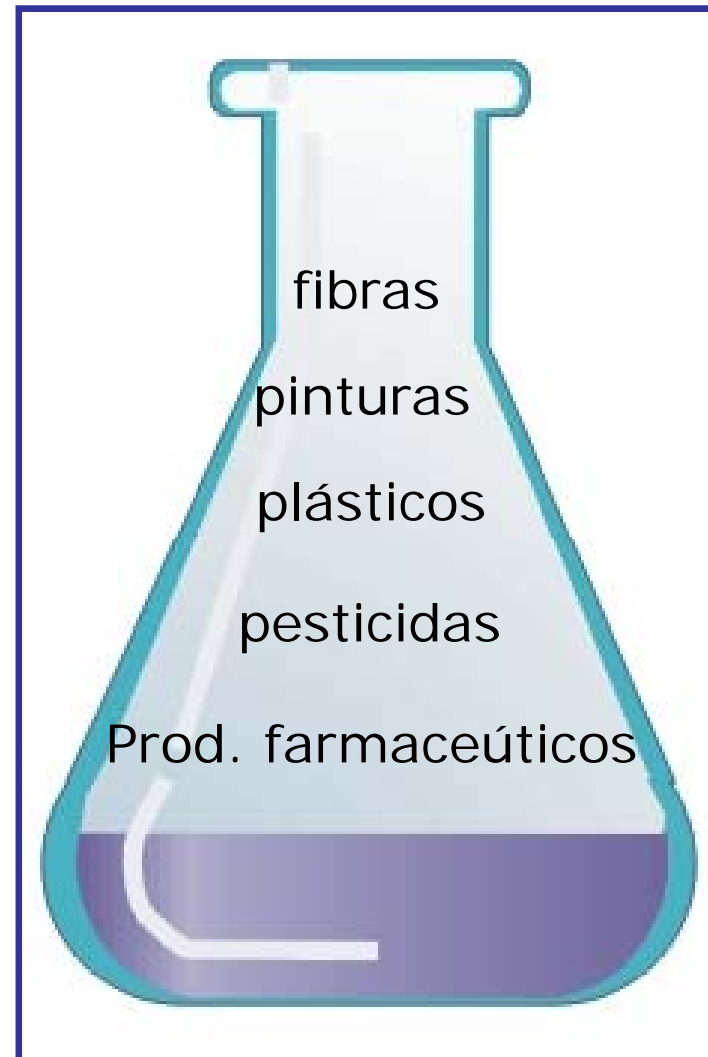
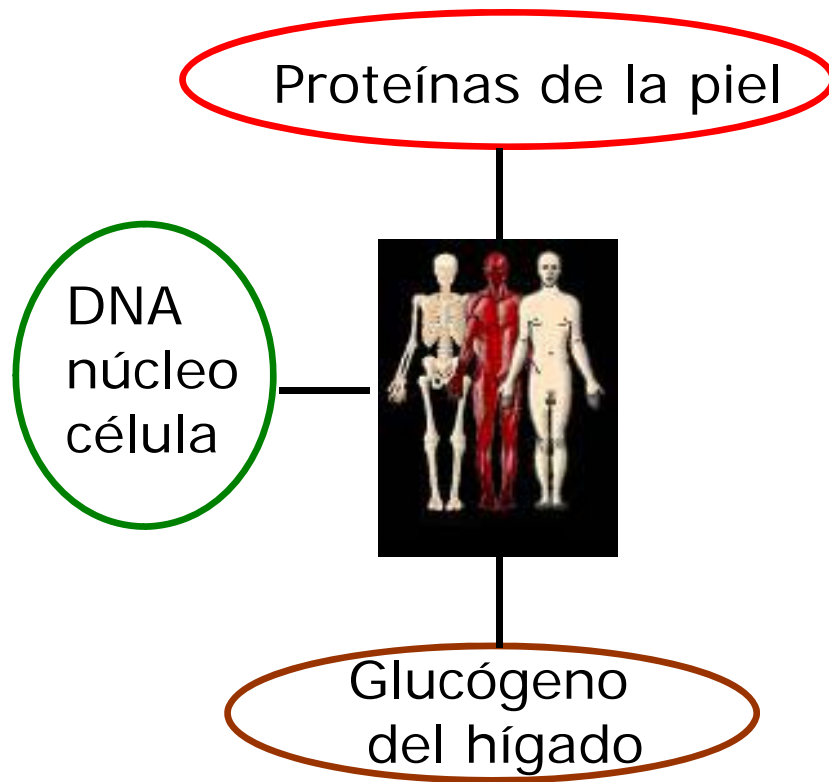
- *L.G. Wade, Organic Chemistry, 6^aEd. Pearson International, 2005*
- *K.P.C. Vollhardt, Organic Chemistry, 4^aEd, Freeman 2003*

LA QUÍMICA ORGÁNICA



Proporciona CO para reemplazar nuestros órganos

Compuestos orgánicos (CO) derivados de nuestros órganos

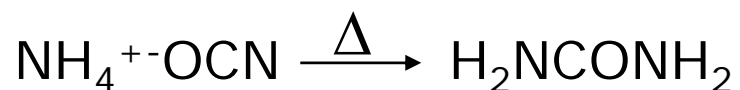


¿Qué es un compuesto orgánico?

La Química Orgánica es la Química de los compuestos de carbono

Vitalismo: los productos naturales necesitan de una fuerza vital para ser creados

XIX 1828 Wöhler

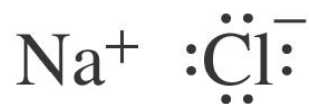


¿Qué tiene de especial el carbono?

Enlaces fuerte

Variadas cadenas

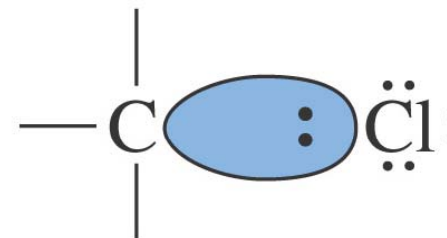
La formación de un enlace.



iónico



covalente no polar

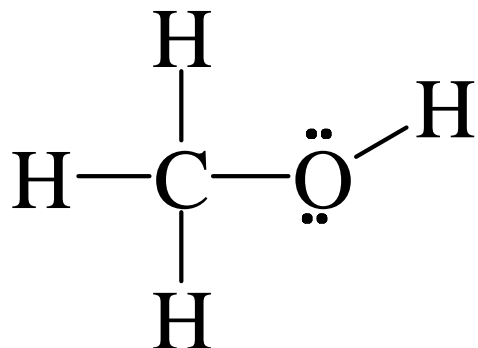


covalente polar

Enlace iónico: los electrones son transferidos

Enlace covalente: se comparte un par de electrones

Lewis. La regla del octeto



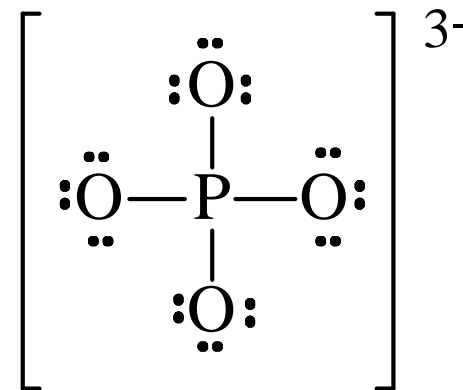
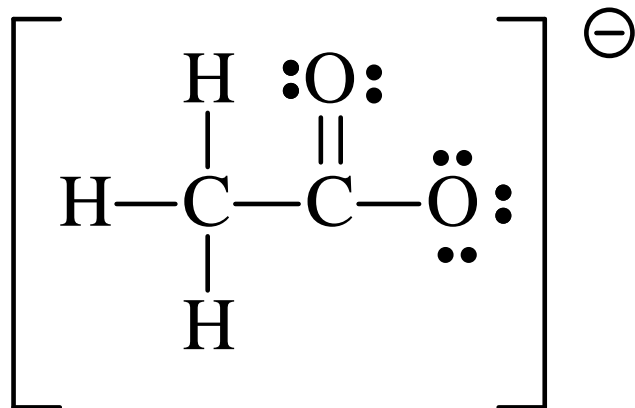
electrones no enlazantes

Estructura de Lewis. Carga formal

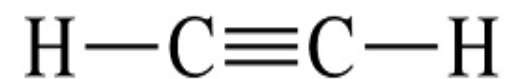
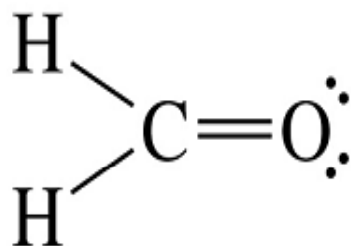
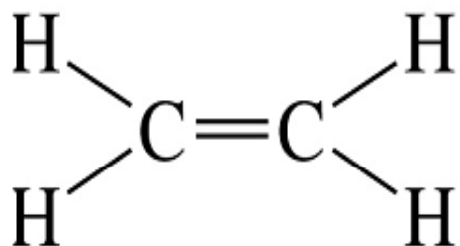
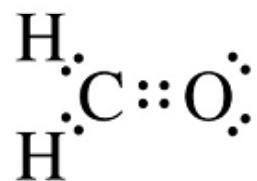
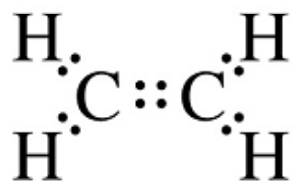
Carga formal

Dibujar la Estructura de Lewis:

1. Contar el número de electrones de valencia
2. Restar los electrones no enlazantes
3. Restar la mitad de los electrones que forman los enlaces

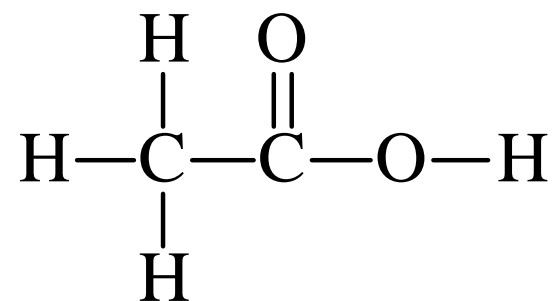


Enlace covalente. Enlace múltiple

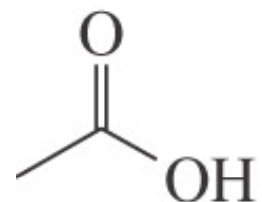


Fórmulas estructurales

Fórmula estructural completa



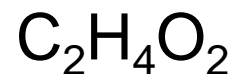
Fórmula lineoangular



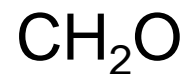
Estructura condensada



Fórmula molecular



Fórmula empírica



Cálculo de Fórmulas Empíricas

Se supone que la muestra pesa 100g en total, los valores porcentuales dan el nº de gramos de cada elemento.

1. Se pasan los gramos a número de moles.
2. Se divide por el número de moles más pequeño para obtener la relación.

La **fórmula molecular** es un múltiplo de la **fórmula empírica**.

Problema

Un compuesto tiene la siguiente composición: 40.0% C, 6.67% H, y 53.3% O. Encuentra la fórmula empírica.

$$\frac{40.0 \text{ gC}}{12.0 \text{ gC} / \text{molC}} = \frac{3.33 \text{ molC}}{3.33} = 1$$

$$\frac{6.67 \text{ gH}}{1.01 \text{ gH} / \text{molH}} = \frac{6.60 \text{ molH}}{3.33} = 1.98 = 2$$

$$\frac{53.5 \text{ gO}}{16.0 \text{ gO} / \text{molO}} = \frac{3.33 \text{ molO}}{3.33} = 1$$



Ángulos de enlace e hibridaciones

Los **ángulos de enlace** no se pueden explicar teniendo en cuenta orbitales s y p .



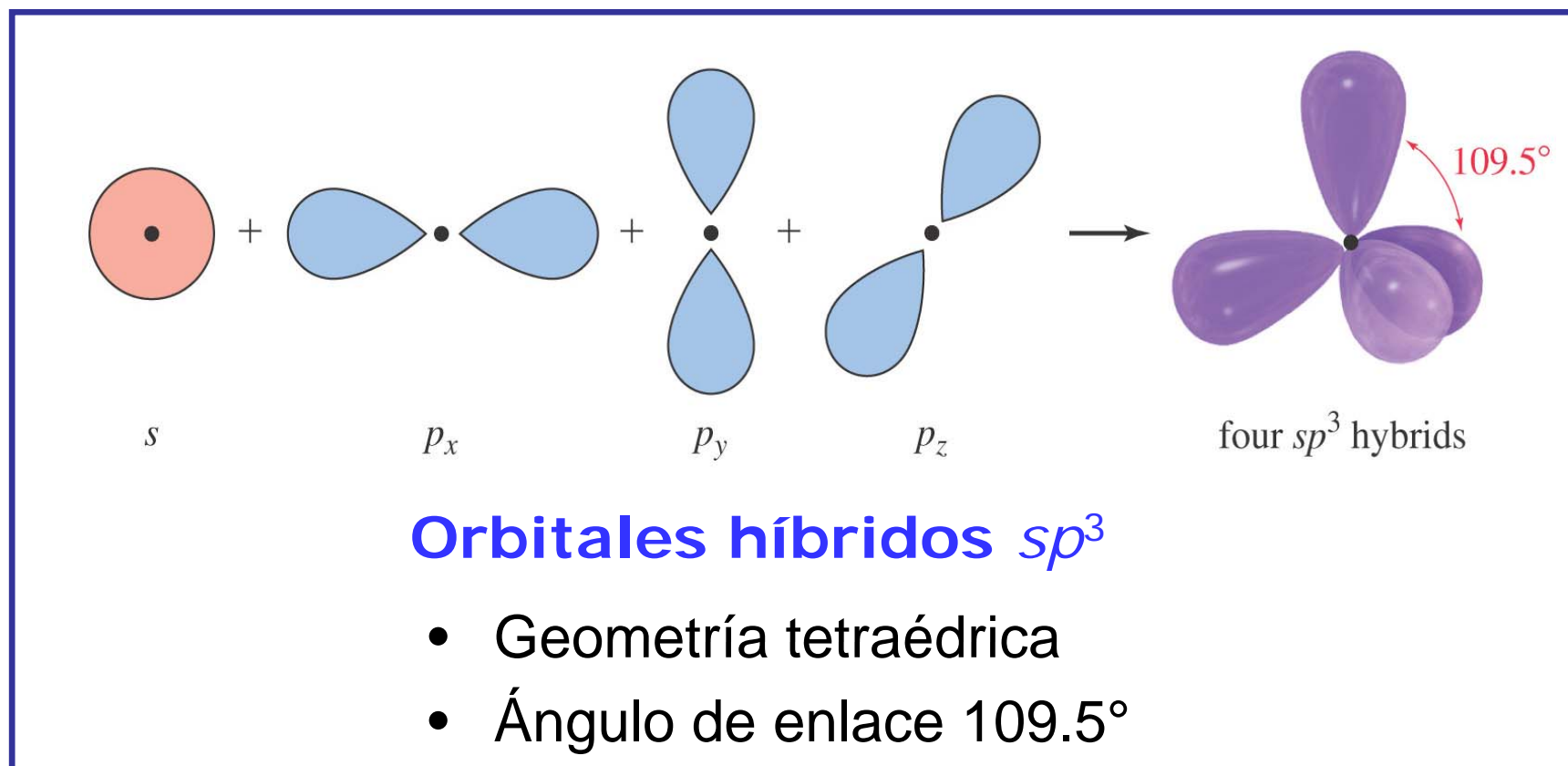
Los **orbitales híbridos** son más bajos en energía porque los pares de electrones se encuentran más alejados.

La **hibridación** es una combinación lineal de orbitales atómicos.

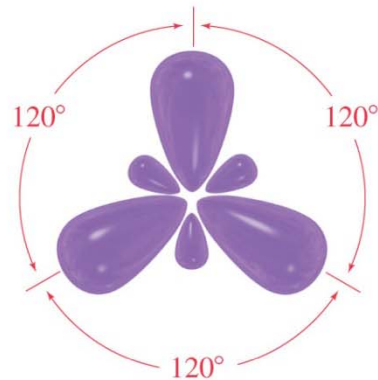
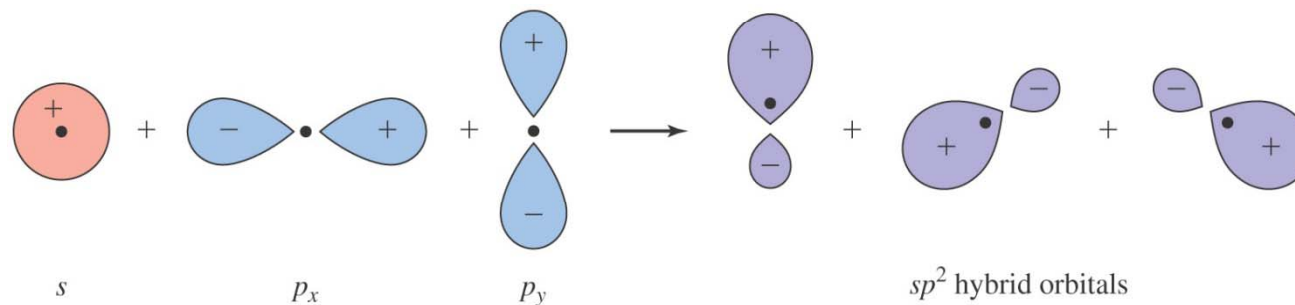
¿Cómo es el átomo de carbono y porqué da lugar a tantos compuestos orgánicos?

C $2s^2 2p^2$

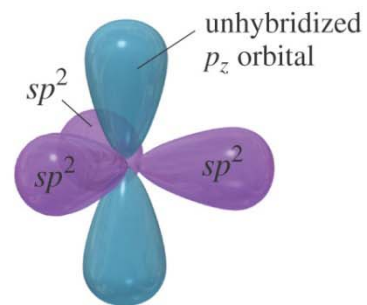
Hibridaciones



Orbitales híbridos sp^2



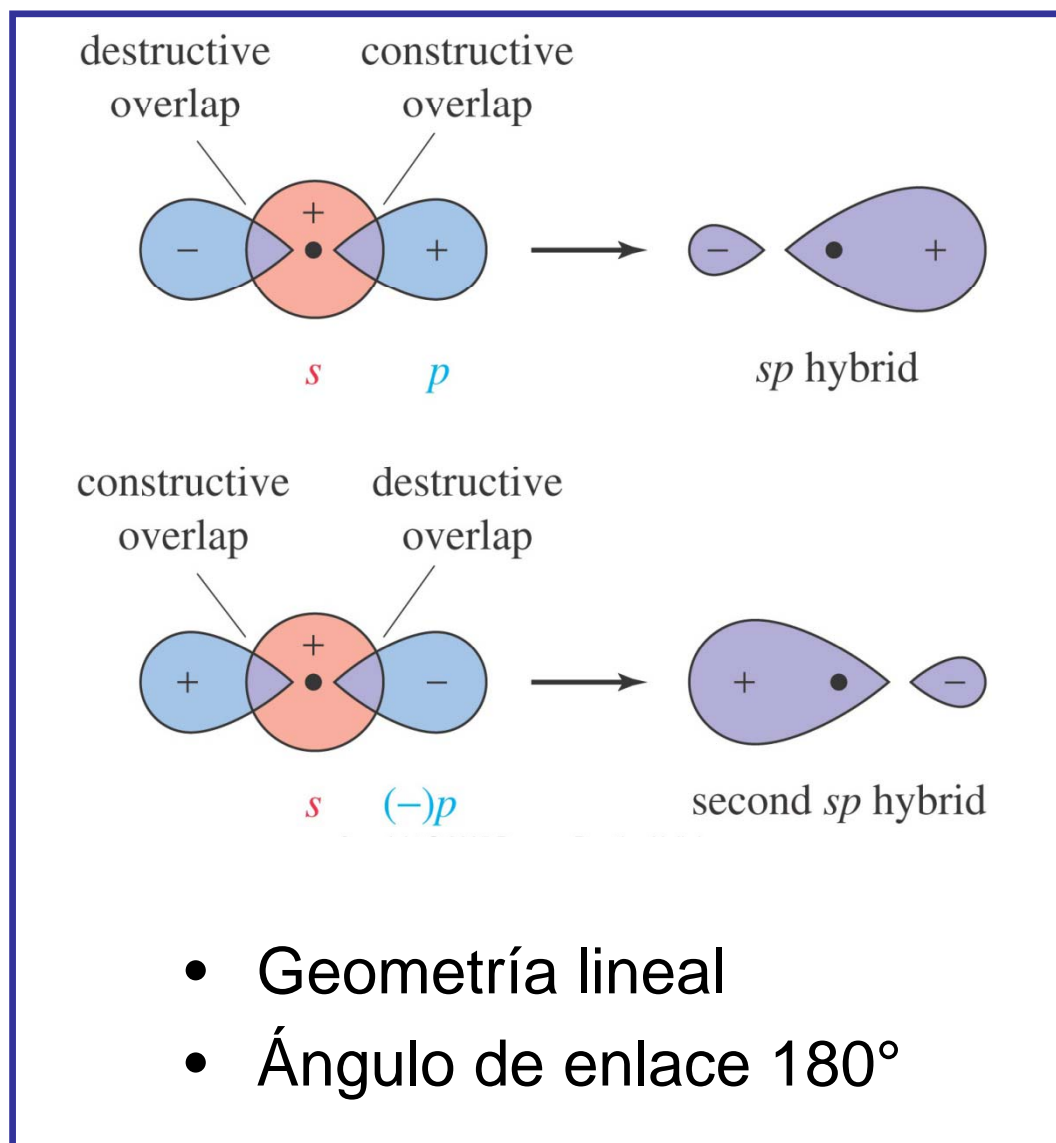
three sp^2 hybrid orbitals superimposed



sp^2 hybrid carbon atom
(viewed from the side)

- Geometría trigonal plana
- Ángulo de enlace 120°

Orbitales híbridos sp





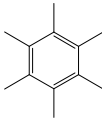










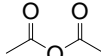




Un **compuesto orgánico** es una entidad molecular que se le añaden eventualmente heteroátomos (oxígeno, nitrógeno, halógenos, azufre y fósforo).

Grupo funcional: agrupación atómica que comunica unas propiedades características a los compuestos que lo portan.



Grupos funcionales más usuales

Tipo de compuesto	Estructura general	Grupo funcional
Hidrocarburos		
Alcanos	R-H	
Alquenos	$\begin{array}{c} \text{H(R)} \\ \\ \text{(R)H} = \text{C} = \text{C} \\ \\ \text{(R)H} \end{array}$ 	
Alquinos	$\text{H(R)} \text{---} \text{C} \equiv \text{C} \text{---} \text{(R)H}$ 	
Aromáticos	$\begin{array}{c} \text{H(R)} \\ \\ \text{(R)H} - \text{C}_6\text{H}_2 - \text{H(R)} \\ \\ \text{(R)H} \end{array}$ 	
Derivados de los hidrocarburos		
Halogenuros de alquilo	R-X/Ar-X (X=F,Cl,Br,I)	
Derivados de agua		
Alcoholes y fenoles	R-(Ar)-CH ₂ -OH y Ar-OH	
Derivados y análogos de los alcoholes		
Éteres	R ₁ -O-R ₂	
Tioles	R-(Ar)-SH	

Tipo de compuesto	Estructura general	Grupo funcional
Compuestos carbonilos		
Aldehídos	R-CHO	
Cetonas	R ₁ -CO-R ₂	
Compuestos carboxílicos		
Ácidos carboxílicos	R-COOH	
Derivados de compuestos carboxílicos		
Ésteres de ácido carboxílico	R ₁ -COO-R ₂	
Anhídridos de ácido carboxílico	R ₁ -CO-O-CO-R ₂	
Halogenuros de ácido carboxílico	R-COX	
Amidas	R-CONH ₂ , R ₁ -CONH(R ₂), R-CO-N<	
Nitrilos	R-CN	
Derivados del amoniaco		
Aminas	R-NH ₂ , R ₁ -NH-R ₂ , R-N<	

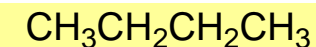
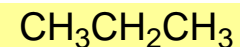
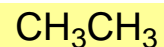
Grupos funcionales más usuales

Alcanos (hidrocarburos saturados)

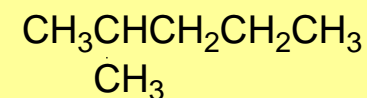
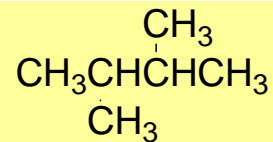
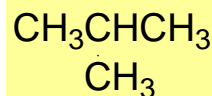
Enlace covalente sencillo, σ

Tipos:

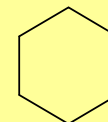
- Alcanos lineales



- Alcanos ramificados



- Cicloalcanos




Grupos funcionales más usuales

Alcanos (hidrocarburos saturados)

Por eliminación de uno o varios átomos de hidrógeno a partir de una molécula de alcano se obtiene un grupo hidrocarbonado que posee un enlace sencillo.

Grupos alquilo, R-



metilo	Me-	CH ₃ -
metileno		-CH ₂ -
etilo	Et-	C ₂ H ₅ -
propilo	Pr-	C ₃ H ₇ -
isopropilo	i-Pr-	(CH ₃) ₂ CH-
isobutilo	i-Bu-	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ -
sec-butilo	s-Bu-	CH ₃ CH ₂ CHCH ₃
tert-butilo	t-Bu	(CH ₃) ₃ C-
ciclopropilo	c-Pr	
ciclohexilo	c-He	

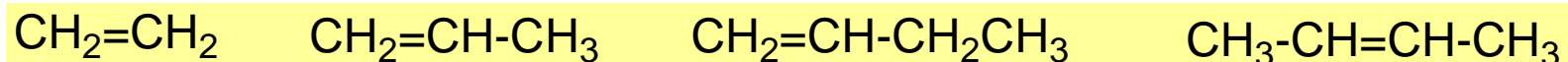
Grupos funcionales más usuales

Alquenos (u olefinas)

Son **hidrocarburos insaturados** acíclicos que poseen uno o varios dobles enlaces C=C.

Distintas categorías de olefinas:

- Olefinas simples



- Dienos, trienos, polienos no conjugados



- Dienos, trienos, polienos conjugados



Productos derivados de etileno y sus aplicaciones

polietilenos

LDPE (polimerización radicalaria;

1000-2000 atm; 200°C)

HDPE (polimerización tipo Ziegler;

1 atm; 60-70°C)

cloruro de vinilo

PVC (polimerización radicalaria)

etanol

acetato de vinilo

PVA

alcohol polivinílico

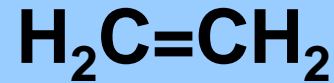
óxido de etileno

esterilizante

detergentes no iónicos

intermedio de síntesis

preparación de etilenglicol



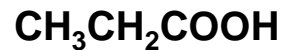
estireno

a partir de etilbenceno

monómero del PS

preparación de copolímeros
(cauchos)

otros



acetaldehído

preparación de n-butanol

preparación de ácido acético

Grupos funcionales más usuales

Alquenos (u olefinas)

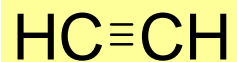
Grupos alquenilo:

- Vinilo $\text{CH}_2=\text{CH}_2-$
- Alilo $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2-$

Alquinos

Son los **hidrocarburos insaturados** acíclicos que poseen uno o varios triples enlaces.

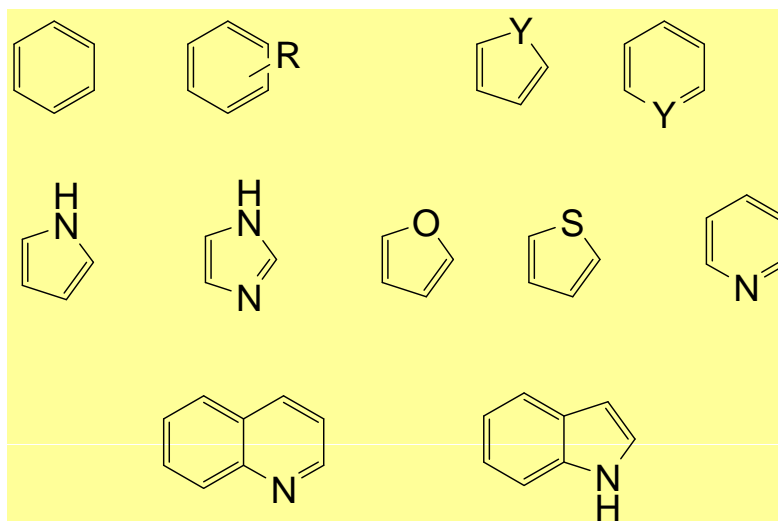
Acetileno o etino



Grupos funcionales más usuales

Aromáticos

Son hidrocarburos insaturados mono- o policíclicos planos que tienen electrones que se deslocalizan por efecto mesómero, efecto que les confiere una estabilidad química considerable.



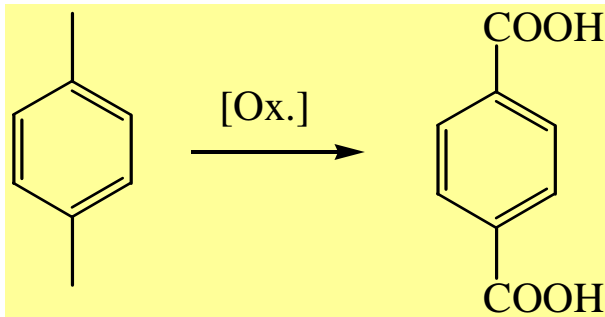
Grupos arilo

Fenilo: Ph-, C₆H₅-
Bencilo: C₆H₅CH₂-

Productos químicos derivados de XILENOS

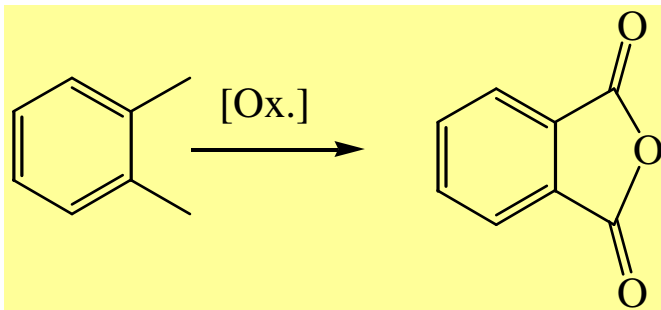
Aplicaciones

disolvente; gasolinas; productos de oxidación



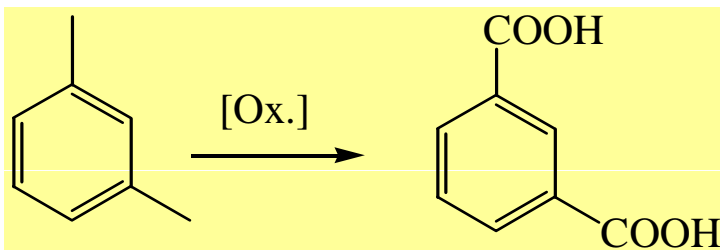
ácido tereftálico

obtención de poliésteres



anhídrido ftálico

obtención de poliésteres; plastificantes; pinturas



ácido isoftálico

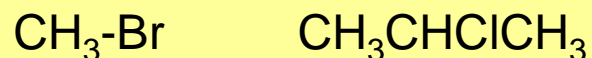
mejora la resistencia a disolventes en resinas y poliésteres

Grupos funcionales más usuales

Halogenuros (derivados de los hidrocarburos)

Son compuestos orgánicos halogenados que pueden considerarse como derivados de los hidrocarburos porque se obtienen al reemplazar un átomo o varios átomos de hidrógeno de la molécula de hidrocarburo por uno o varios átomos de halógeno $R-CH_3$ **$R-CH_2X$**

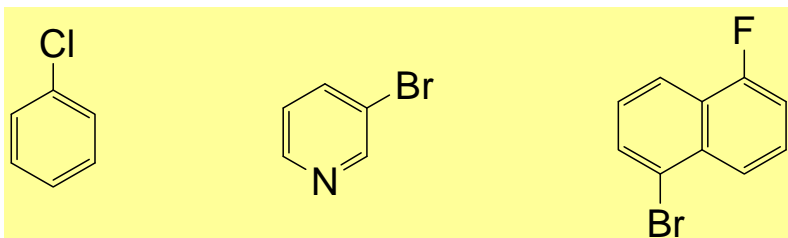
- Los halogenuros de alquilo (o haloalcanos)



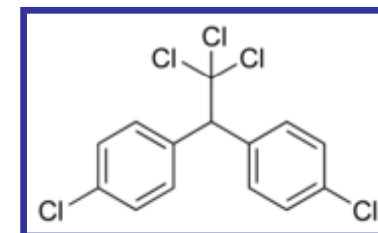
- Los halogenuros de alqueno



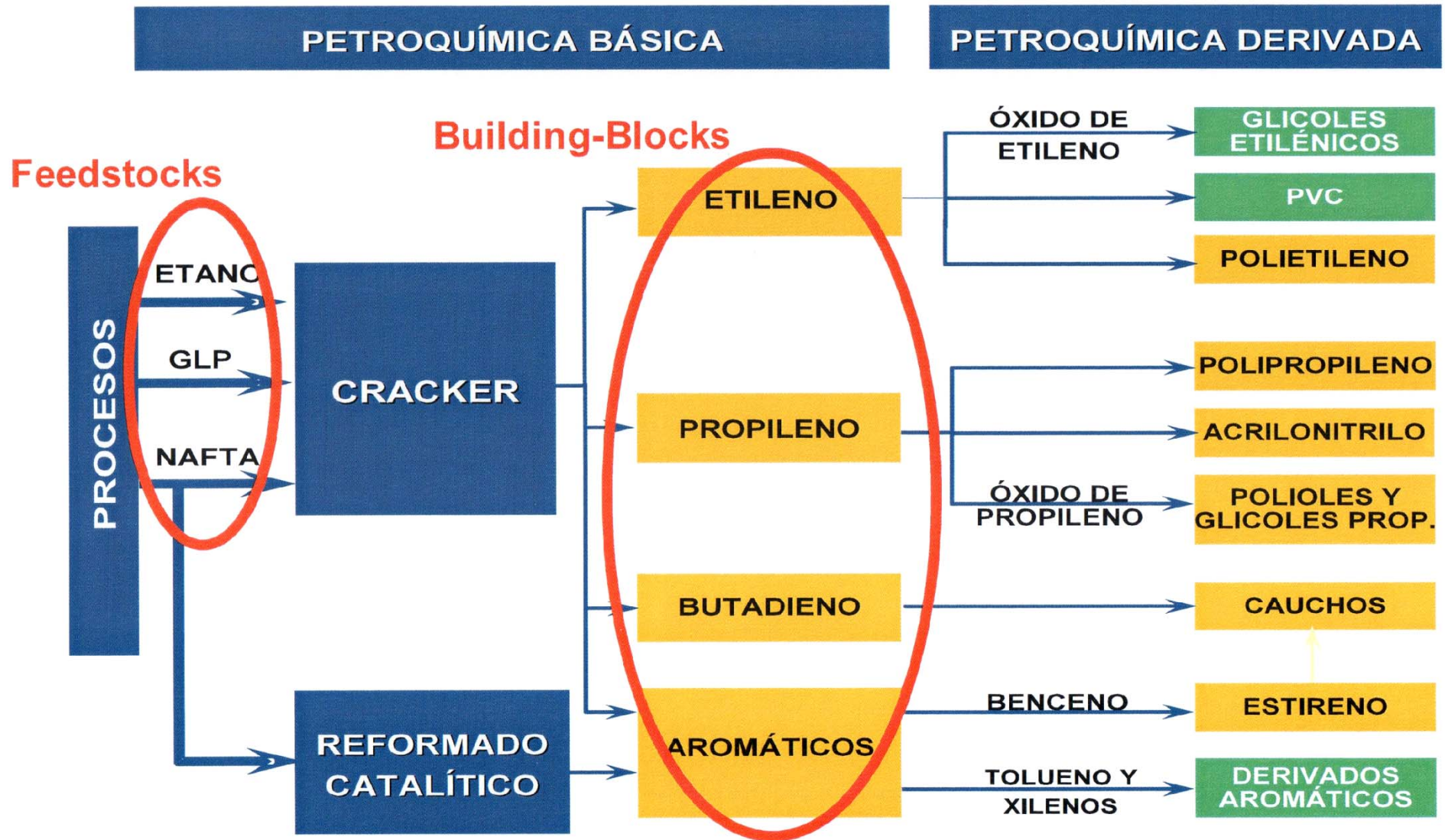
- Los halogenuros aromáticos (o de arilo)



DDT



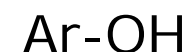
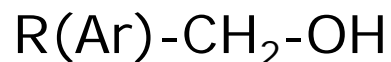
Descripción del sector petroquímico



Grupos funcionales más usuales

Alcoholes y fenoles

(derivados del agua o compuestos hidroxílicos)



Compuestos orgánicos oxigenados que pueden considerarse como *derivados del agua*, HOH, porque se obtienen al desplazar un átomo de hidrógeno de la molécula de agua por un grupo alquilo o arilo.

En el caso de los **alcoholes**, este grupo se une a la parte saturada de un grupo alquilo, R-CH₂-.

En el caso de los **fenoles**, este grupo se une directamente al núcleo aromático.

Grupos funcionales más usuales

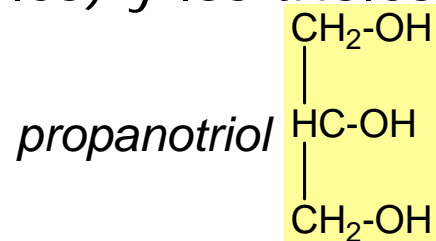
Alcoholes y fenoles (derivados del agua o compuestos hidroxílicos)

Según el grupo hidrocarbonado:

- Alcoholes saturados $R-CH_2-OH$
- Alcoholes insaturados $R-CH=CH-CH_2-OH$
- Alcoholes aromáticos $Ar-CH_2-OH$

Según el número de funciones hidroxilo:

- Monoalcoholes CH_3-OH
- Polialcoholes: los dialcoholes (o glicoles) y los trioles



Según el tipo de carbono que lleva el grupo funcional:

- Alcoholes primarios $R-CH_2-OH$
- Alcoholes secundarios R_1R_2CH-OH
- Alcoholes terciarios $R_1R_2R_3C-OH$

Grupos funcionales más usuales

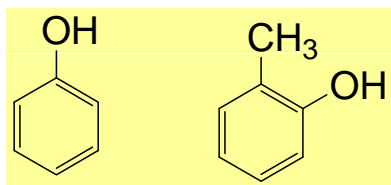
Alcoholes y fenoles

(derivados del agua o compuestos hidroxílicos)

Los alcoholes insaturados de tipo vinílico se denominan **enoles** y son intermedios de reacción importantes.

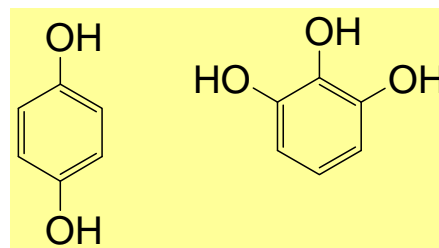
En lo que concierne a los fenoles, se pueden clasificar según el número de grupos funcionales $-OH$:

Monofenoles



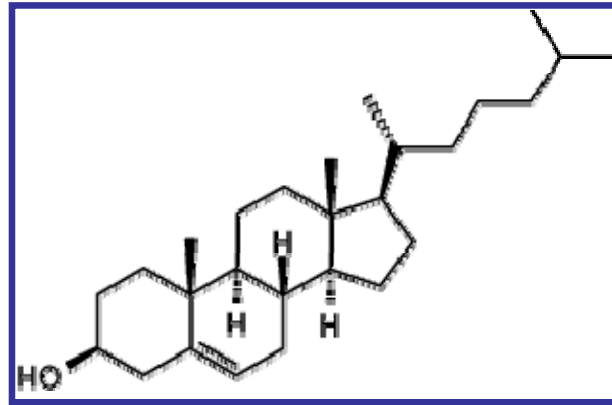
o-cresol

Polifenoles (di-, trifenoles, ...)



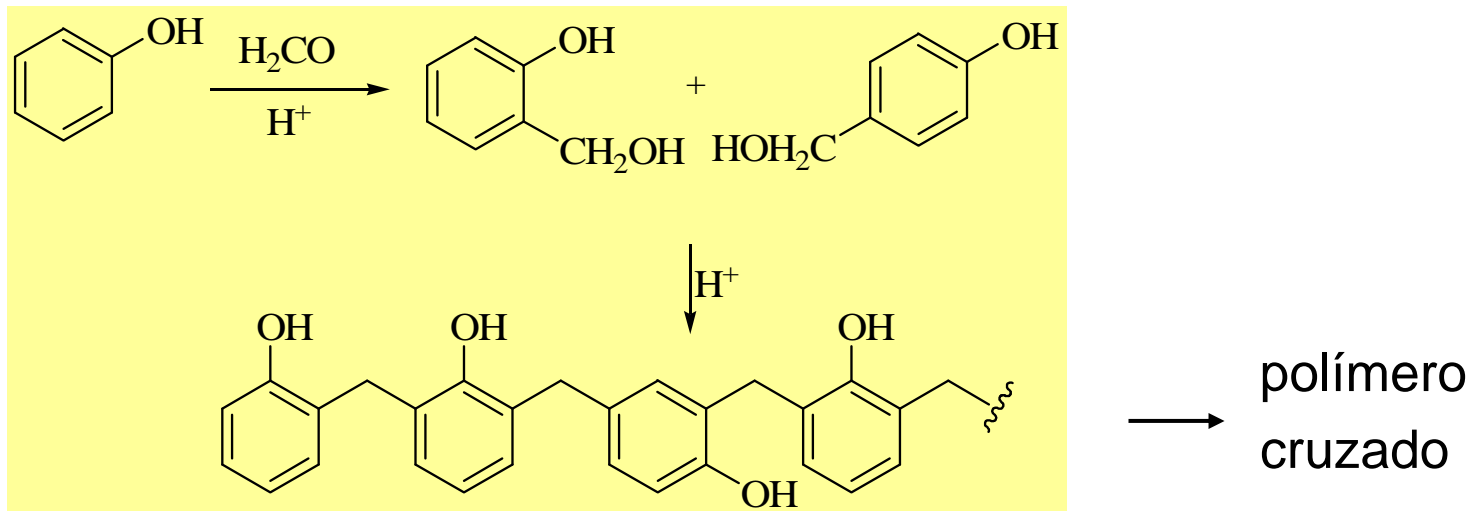
hidroquinona pirogalol

Alcohol



Fenol

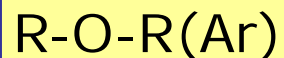
- ♦ Obtención de resinas (condensación de fenol y formaldehído)



Grupos funcionales más usuales

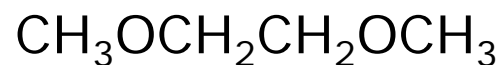
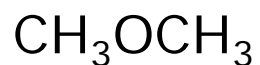
Éteres (o derivados de los alcoholes)

Los éteres son compuestos orgánicos oxigenados que pueden considerarse como **derivados de los alcoholes**, se obtienen al reemplazar el átomo de hidrógeno del grupo hidroxilo, -OH de un alcohol por un grupo alquilo, R- o arilo, Ar-.

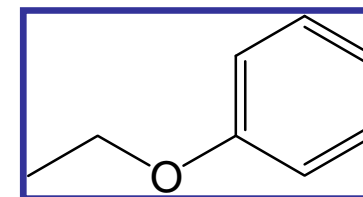


Hay que señalar la existencia de:

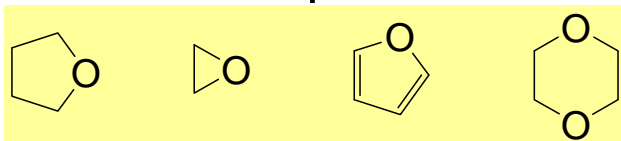
- Éteres acíclicos



Nerolin II



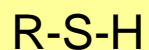
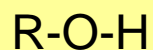
- Éteres cíclicos: cicloalcanos en los que un átomo de carbono se ha reemplazado un carbono por un heteroátomo



Grupos funcionales más usuales

Tioles (o análogos de los alcoholes)

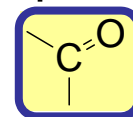
Son compuestos orgánicos sulfurados se pueden considerar **análogos a los alcoholes** porque se obtienen por reemplazo del átomo del oxígeno del grupo hidroxilo, -OH de un alcohol por un átomo de azufre. El grupo funcional obtenido se denomina mercapto o grupo sulfhidrilo, -SH.



Grupos funcionales más usuales

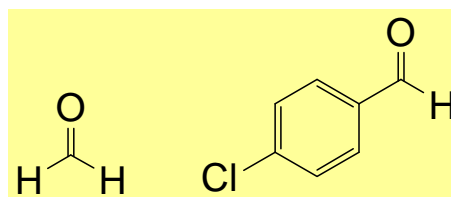
Aldehídos y cetonas (o compuestos carbonílicos)

Son compuestos orgánicos oxigenados que contienen el grupo funcional carbonilo en la molécula,



- Aldehídos

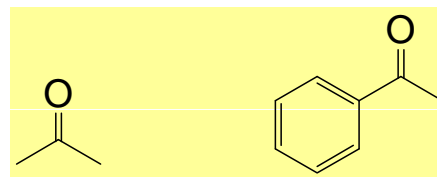
formaldehído



p-clorobenzaldehído

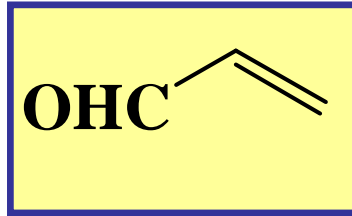
- Cetonas

acetona



acetofenona

ACROLEÍNA

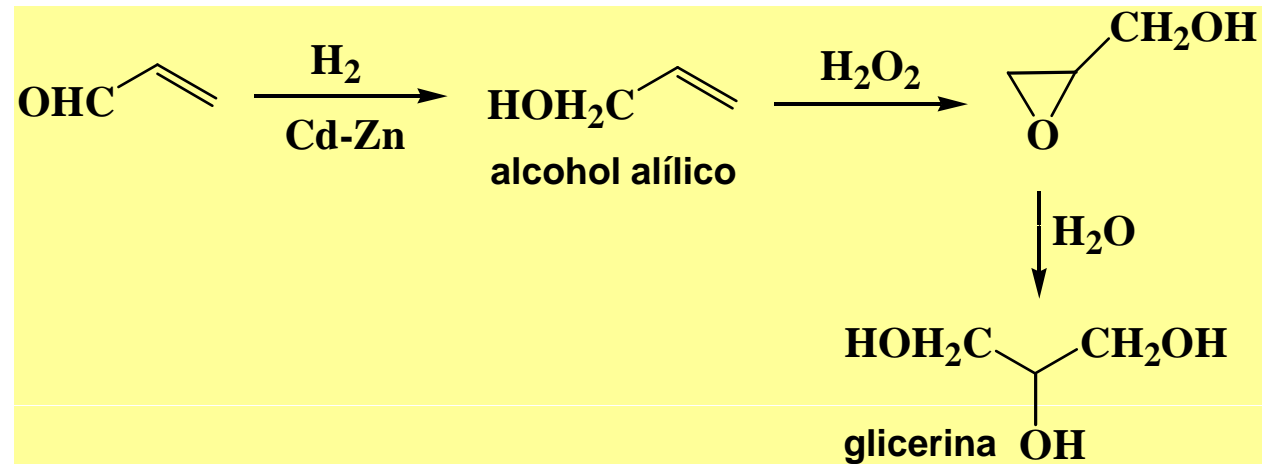


Aplicación

Obtención de **glicerina**

Aplicaciones

farmacia, cosmética
resinas alquídicas
trinitrato de glicerina



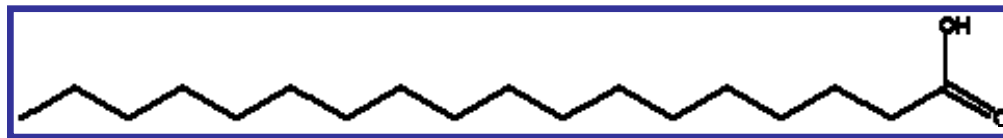
Grupos funcionales más usuales

Ácidos carboxílicos e hidroxiaácidos

Los **ácidos carboxílicos** son compuestos oxigenados que contienen en la molécula el grupo funcional -COOH.

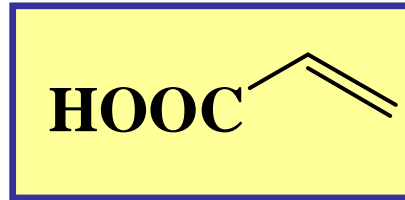
Según el número de grupos funcionales:

- Ácidos monocarboxílicos
- Ácidos policarboxílicos



Los **hidroxiaácidos** son compuestos polifuncionales porque sus moléculas cuentan con un grupo carboxilo, -COOH y uno o varios grupos hidroxilo, -OH que se puede unir a la parte saturada de un grupo alquilo o arilo o bien directamente al núcleo aromático.

ACIDO ACRÍLICO



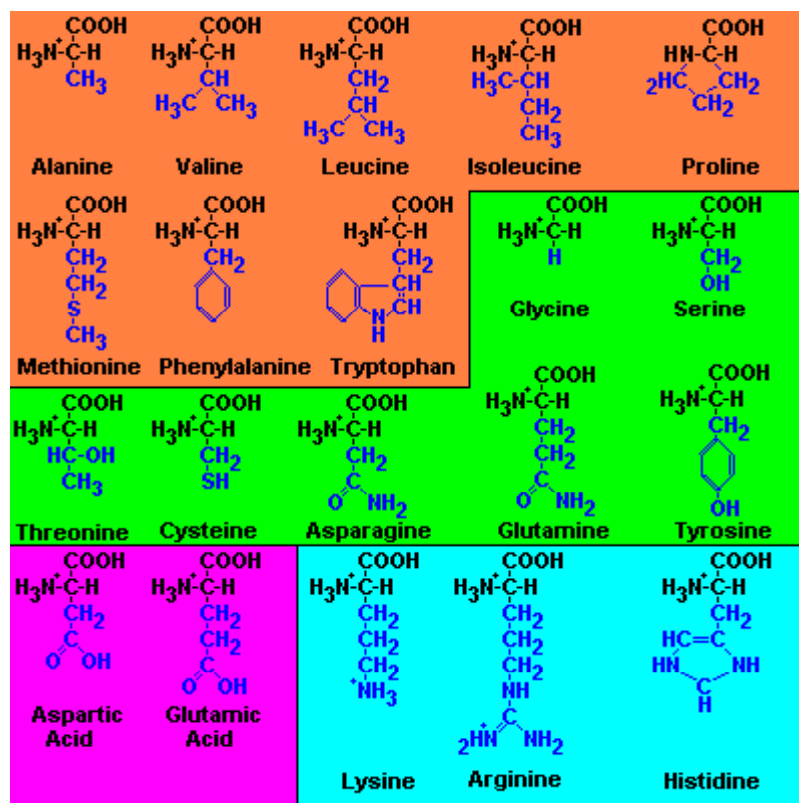
Aplicación

{
espesantes de cauchos
preparación de ésteres → **acrilato de etilo** → pinturas al agua

Grupos funcionales más usuales

Aminoácidos

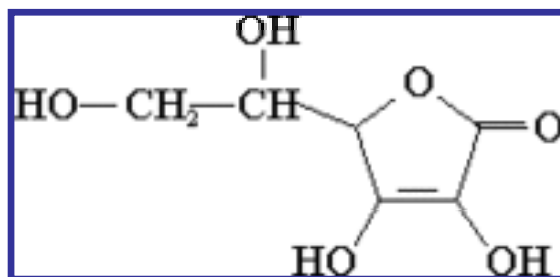
Los **aminoácidos** son compuestos polifuncionales que cuentan además de un grupo carboxilo, $-\text{COOH}$ con uno o varios grupos amino, $-\text{NH}_2$.



Grupos funcionales más usuales

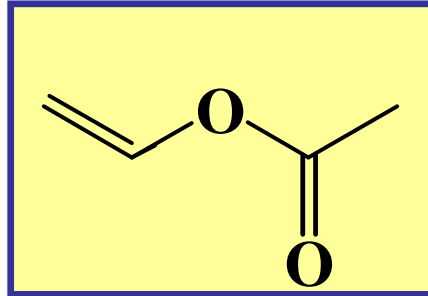
Ésteres (derivados de ácidos carboxílicos)

Son derivados de ácidos carboxílicos porque se obtienen al reemplazar un átomo de hidrógeno de la función carboxilo, -COOH de un ácido por un radical alquilo R- o arilo, Ar-.



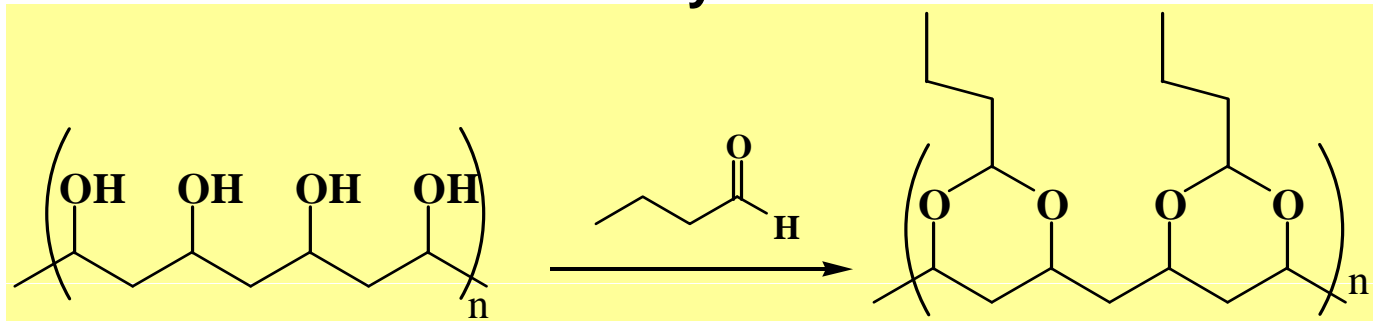
Vitamina C

ACETATO DE VINILO



Aplicación

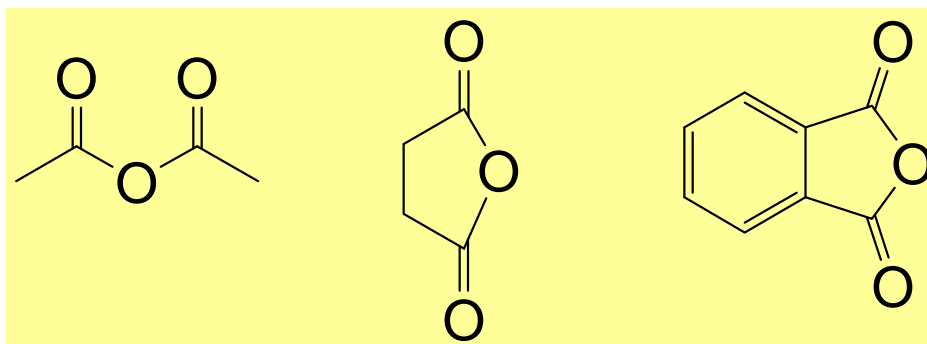
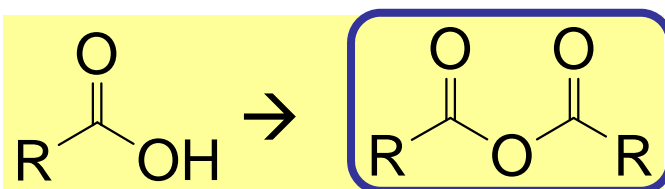
Preparación de **ALCOHOL POLIVINÍLICO** y de **POLIVINILBUTIRAL**



Grupos funcionales más usuales

Anhídridos de ácido carboxílico

Son derivados de ácidos carboxílicos porque se obtienen al reemplazar un átomo de hidrógeno de la función carboxilo, -COOH, de un ácido, por otro grupo acilo, -COR.

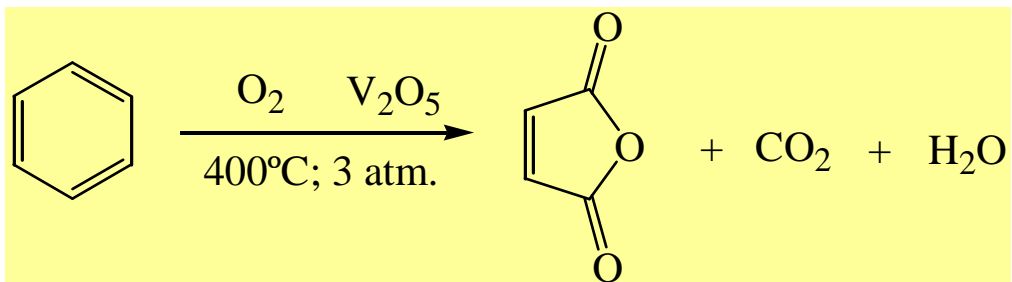


anh acético

anh succínico

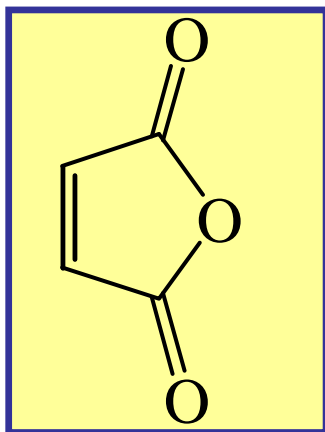
anh ftálico

ANHIDRIDO MALEICO



QUITAR

ANHIDRIDO MALEICO



copolímero en la preparación de poliésteres

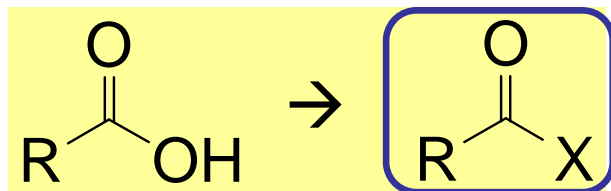
obtención de disolventes (por hidrogenación)

intermedio de síntesis: medicamentos, herbicidas e insecticidas

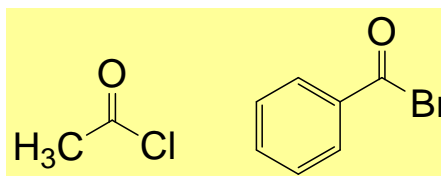
Grupos funcionales más usuales

Haluros de ácido (derivados de ácidos carboxílicos)

Son derivados de ácidos carboxílicos porque se obtienen al reemplazar el grupo hidroxilo, -OH, del grupo carboxilo por un átomo de halógeno, -X.



cloruro de acetilo

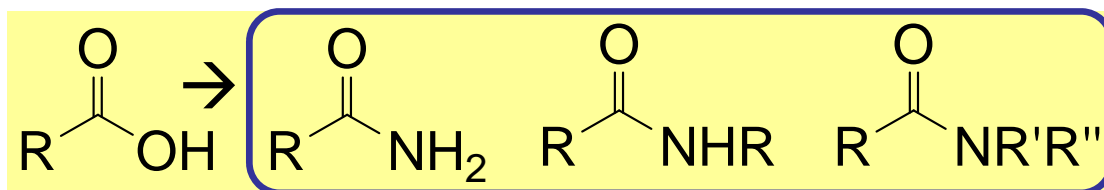


bromuro de benzoilo

Grupos funcionales más usuales

Amidas

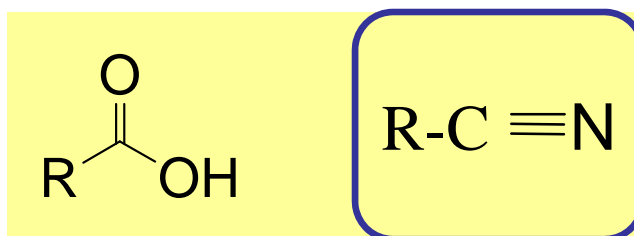
Son derivados de ácidos carboxílicos porque se obtienen al reemplazar el grupo hidroxilo, -OH, del grupo carboxilo por un átomo de nitrógeno que lleva o no sustituyentes.



Grupos funcionales más usuales

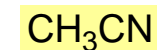
Nitrilos

Se pueden considerar como derivados de ácidos carboxílicos. Se obtienen al reemplazar el oxígeno doblemente unido y el grupo hidroxilo, -OH, de un ácido carboxílico por un átomo de nitrógeno.



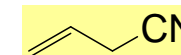
- Nitrilos saturados, RCN

acetonitrilo



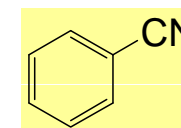
- Nitrilos insaturados, RCH=CHCN

acrilonitrilo

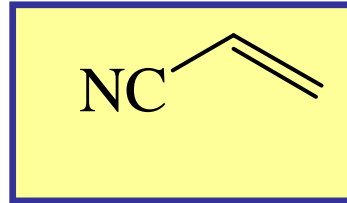


- Nitrilos aromáticos, ArCN

benzonitrilo



ACRILONITRILO



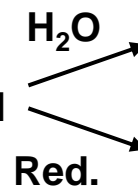
Aplicación

plásticos y cauchos sintéticos: ABS SAN

fibras acrílicas

intermedio de síntesis

preparación de adiponitrilo: $\text{CN}-(\text{CH}_2)_4-\text{CN}$



Ácido adípico: $\text{HOOC}-(\text{CH}_2)_4-\text{COOH}$

Hexametildiamina: $\text{H}_2\text{N}-(\text{CH}_2)_6-\text{NH}_2$

NYLON

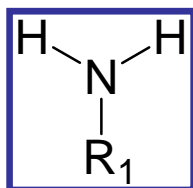
Grupos funcionales más usuales

Aminas (o derivados del amoniaco)

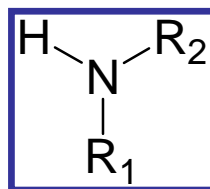
Son compuestos orgánicos que contienen un átomo de nitrógeno y que se pueden considerar como derivados del amoniaco porque se obtienen a partir del amoniaco por reemplazo parcial o total de los átomos de hidrógeno por uno o varios radicales orgánicos.

Según el número de átomos de hidrógeno reemplazados

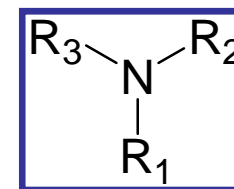
Aminas primarias



aminas secundarias



aminas terciarias



Grupos funcionales más usuales

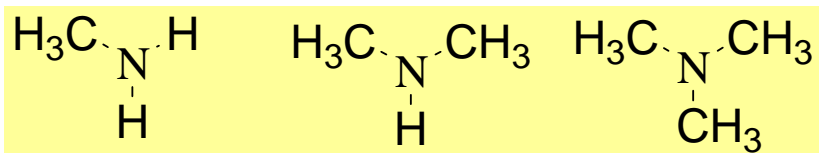
Aminas (o derivados del amoniaco)

Según el número de funciones amina:

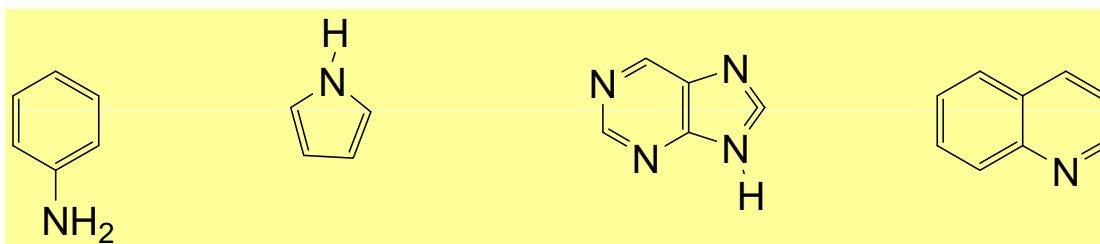
- Monoaminas
- Diaminas, triaminas y poliaminas

Según el radical orgánico:

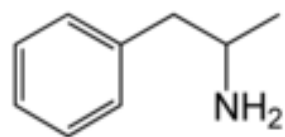
- Aminas saturadas



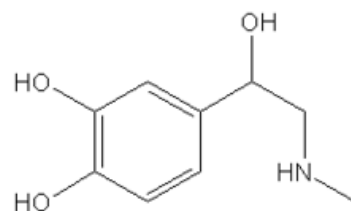
- Aminas aromáticas



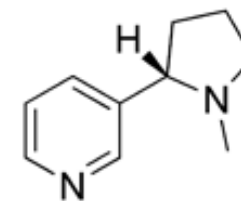
AMINAS



anfetamina

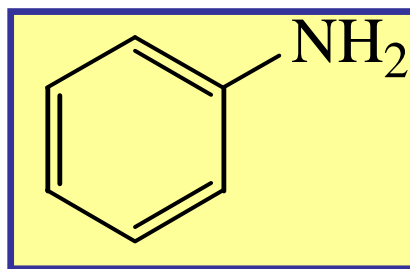


adrenalina

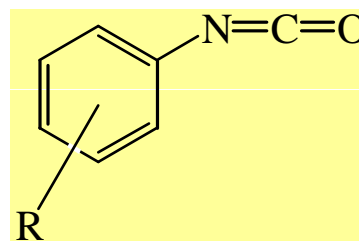


nicotina

ANILINA



intermedio de síntesis
industria de colorantes
industria farmacéutica
aditivo del caucho
preparación de isocianatos



→ poliuretanos

Módulo A. Estructura , propiedades físicas, ácido-base y espectroscópicas de los compuestos orgánicos

Tema 2. Naturaleza, formulación y nomenclatura de los compuestos orgánicos

Las imágenes utilizadas para la preparación de este tema proceden de dos libros de Química Orgánica:

- *L.G. Wade, Organic Chemistry, 6^aEd. Pearson International, 2005*
- *K.P.C. Vollhardt, Organic Chemistry, 4^aEd, Freeman 2003*