



ANTOLOGIA

Química Orgánica

Licenciatura en Nutrición

Primer Cuatrimestre

Marco Estratégico de Referencia

ANTECEDENTES HISTORICOS

Nuestra Universidad tiene sus antecedentes de formación en el año de 1979 con el inicio de actividades de la normal de educadoras “Edgar Robledo Santiago”, que en su momento marcó un nuevo rumbo para la educación de Comitán y del estado de Chiapas. Nuestra escuela fue fundada por el Profesor de Primaria Manuel Albores Salazar con la idea de traer Educación a Comitán, ya que esto representaba una forma de apoyar a muchas familias de la región para que siguieran estudiando.

En el año 1984 inicia actividades el CBTiS Moctezuma Ilhuicamina, que fue el primer bachillerato tecnológico particular del estado de Chiapas, manteniendo con esto la visión en grande de traer Educación a nuestro municipio, esta institución fue creada para que la gente que trabajaba por la mañana tuviera la opción de estudiar por las tardes.

La Maestra Martha Ruth Alcázar Mellanes es la madre de los tres integrantes de la familia Albores Alcázar que se fueron integrando poco a poco a la escuela formada por su padre, el Profesor Manuel Albores Salazar; Víctor Manuel Albores Alcázar en septiembre de 1996 como chofer de transporte escolar, Karla Fabiola Albores Alcázar se integró como Profesora en 1998, Martha Patricia Albores Alcázar en el departamento de finanzas en 1999.

En el año 2002, Víctor Manuel Albores Alcázar formó el Grupo Educativo Albores Alcázar S.C. para darle un nuevo rumbo y sentido empresarial al negocio familiar y en el año 2004 funda la Universidad Del Sureste.

La formación de nuestra Universidad se da principalmente porque en Comitán y en toda la región no existía una verdadera oferta Educativa, por lo que se veía urgente la creación de una institución de Educación superior, pero que estuviera a la altura de las exigencias de los jóvenes que tenían intención de seguir estudiando o de los profesionistas para seguir preparándose a través de estudios de posgrado.

Nuestra Universidad inició sus actividades el 18 de agosto del 2004 en las instalaciones de la 4ª avenida oriente sur no. 24, con la licenciatura en Puericultura, contando con dos grupos de cuarenta alumnos cada uno. En el año 2005 nos trasladamos a nuestras propias instalaciones en la carretera Comitán – Tzimol km. 57 donde actualmente se encuentra el campus Comitán y el Corporativo UDS, este último, es el encargado de estandarizar y controlar todos los procesos operativos y Educativos de los diferentes Campus, Sedes y Centros de Enlace Educativo, así como de crear los diferentes planes estratégicos de expansión de la marca a nivel nacional e internacional.

MISIÓN

Satisfacer la necesidad de Educación que promueva el espíritu emprendedor, aplicando altos estándares de calidad Académica, que propicien el desarrollo de nuestros alumnos, Profesores, colaboradores y la sociedad, a través de la incorporación de tecnologías en el proceso de enseñanza-aprendizaje.

VISIÓN

Ser la mejor oferta académica en cada región de influencia, y a través de nuestra Plataforma Virtual tener una cobertura Global, con un crecimiento sostenible y las ofertas académicas innovadoras con pertinencia para la sociedad.

VALORES

- Disciplina
- Honestidad
- Equidad
- Libertad

ESCUDO



El escudo de la UDS, está constituido por tres líneas curvas que nacen de izquierda a derecha formando los escalones al éxito. En la parte superior está situado un cuadro motivo de la abstracción de la forma de un libro abierto.

ESLOGAN

“Mi Universidad”

ALBORES



Es nuestra mascota, un Jaguar. Su piel es negra y se distingue por ser líder, trabaja en equipo y obtiene lo que desea. El ímpetu, extremo valor y fortaleza son los rasgos que distinguen.

Química Orgánica

Objetivo de la materia:

El alumno al final de curso podrá adquirir los conocimientos básicos sobre la estructura de los compuestos químicos orgánicos e inorgánicos, así como su nomenclatura, propiedades físicas, reactividad e impacto económico y ambiental.

INDICE

UNIDAD I INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA ORGÁNICA	11
1.1. Conceptos básicos de la estructura atómica y molecular	11
1.2. Representación de moléculas orgánicas a partir de estructuras de Lewis	14
1.2.1. Estructuras de Lewis y resonancia.....	14
1.2.2. Geometría molecular a partir de estructuras de Lewis.....	18
1.2.3. Estructura y propiedades de las moléculas.....	27
1.2.4. Modelo de repulsión del par electrónico de la capa de valencia	30
1.2.5. Modelo del orbital molecular Modelo del Orbital Molecular (OM).....	31
1.3. Tipos de enlaces existentes en compuestos orgánicos: Caracterización de cada uno de ellos de acuerdo a: Longitud de enlace, Angulo de enlace, energía de enlace.....	32
1.4. Polaridad de las moléculas.....	32
1.4.1. Momento dipolar.....	33
1.5. Interacciones moleculares	33
1.5.1. Fuerzas dipolo dipolo	34
1.5.2. Puente de hidrógeno.....	35
1.5.3. Fuerzas intermoleculares:.....	35
1.5.4. Fuerzas de Vander Waal.....	38
1.6. Fuerzas electrostáticas.....	40
1.6.1. Grupos funcionales.....	42
1.6.2. Polaridad de los grupos funcionales.....	44
UNIDAD II	47
NOMENCLATURA DE COMPUESTOS ORGANICOS COMUN Y SISTEMÁTICA	47
2.1. Nomenclatura de hidrocarburos.....	47
2.2. Clasificación de los hidrocarburos.....	48
2.3. Compuestos Hidrocarburos Alifáticos.....	48

2.3.1. Saturados: Alcanos y cicloalcanos.	49
2.3.2. Insaturados alquenos y alquinos.	53
2.3.3. Aromáticos.	54
2.3.4. Monocíclicos: benceno.	55
2.3.5. Policíclicos:.....	56
2.4. Compuestos Orgánicos Polifuncionales:	57
2.4.1. Éteres y ésteres.....	58
2.4.2. Alcoholes.	60
2.4.3. Fenoles.....	62
2.4.4. Aldehídos.....	64
2.4.5. Cetonas.....	64
2.4.6. Ácidos carboxílicos.....	65
2.4.7. Heterocíclicos.....	66
2.4.8. Hidrocarburos que contienen nitrógeno.	67
2.4.9. Aminas: Alifáticas, aromáticas.....	67
2.4.10. Amidas.....	68
2.4.11. Aminas Heterocíclicos.....	69
2.4.12. Nitrilos.....	69
2.5. Hidrocarburos que contienen azufre.....	70
UNIDAD III ISOMERIA.....	71
3.1. Conformación de las moléculas y estereoquímica.....	71
3.2. Isómeros constitucionales:.....	71
3.2.1. De cadena.	72
3.2.2. De posición.	72
3.2.3. De función.	73
3.3. Isómeros espaciales (estereoisómeros).....	73
3.4. Isomería conformacional: de alcanos y cicloalcanos:.....	76

3.5. Isomería configuracional (cistrans): en dobles enlaces, en anillo, sistema E-Z.....	77
3.6. Isomería configuracional óptica: Enantiómeros y Diasterómeros	79
UNIDAD IV REACCIONES DE OXIDACION	80
4.1. Reacciones de oxidación en química orgánica	80
4.2. Oxidación de alcanos.....	80
4.2.1. Reacciones de combustión.	80
4.3. Oxidación de alquenos.....	81
4.5. Ruptura oxidativa con permanganato de potasio.	82
4.5. Ruptura oxidativa con ozono.....	82
4.6. Oxidación de alquinos	83
4.7. Oxidación de alcoholes.	83
4.8. Oxidación de cadenas laterales de compuestos aromáticos.....	85
4.9. Oxidación de aminas.	85
BIBLIOGRAFÍA.....	98

“Las lecturas que se presentan en esta antología, forma parte de un compilado de una digitalización de las fuentes originales y se reproducen solo con propósitos educativos sin fines de lucro”.

UNIDAD I INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA ORGÁNICA

I.1. Conceptos básicos de la estructura atómica y molecular

Teoría Atómica

En 1808, John Dalton estableció las hipótesis sobre las que fundó su teoría atómica:

- Los elementos están formados por partículas pequeñas llamadas átomos. Todos los átomos de un elemento son idénticos (tamaño, masa, propiedades químicas) y diferentes de los de otro elemento.
- Los compuestos están formados por átomos de más de un elemento en una relación que es un número entero o una fracción sencilla.
- Una reacción química consiste en la separación, combinación o reordenamiento de los átomos, los cuales no se crean ni se destruyen.

El átomo

Es la unidad básica que puede intervenir en una combinación química. Está formado por partículas subatómicas, de las cuales las más importantes son los electrones, los protones y los neutrones.

- Los electrones son partículas con carga negativa que se encuentran en lugares energéticos conocidos como niveles u orbitales. Su masa es de 9.1×10^{-28} g.
- Los protones son partículas con carga positiva que se encuentran en el núcleo atómico y cuya masa es de 1.67×10^{-24} g.
- Los neutrones son partículas eléctricamente neutras, que se encuentran en el núcleo y que tienen una masa un poco mayor que la de los protones. Partícula Masa (g) Carga Coulombs Carga unitaria
 Electrón 9.1×10^{-28} g -1.6022×10^{-19} - 1
 Protón 1.67×10^{-24} g $+1.6022 \times 10^{-19}$ + 1
 Neutrón 1.675×10^{-24} g 0 0 E
- Número atómico, Masa atómica. Isótopos y Peso atómico
- El número de protones en el núcleo de un elemento se conoce como número atómico (Z).

- El número de protones y de neutrones presentes en el núcleo de un átomo de un elemento se conoce como número de masa. Cuando se mide en uma (unidades de masa atómica, referidas a la masa de un átomo de carbono 12), se llama masa atómica (A). $A = p + n$
- Algunos elementos presentan más de una masa atómica, dependiendo del número de neutrones en su núcleo. A estos átomos se les llama isótopos.
- El peso atómico de un elemento es el promedio de las masas de los isótopos naturales expresado en uma.

Modelos atómicos

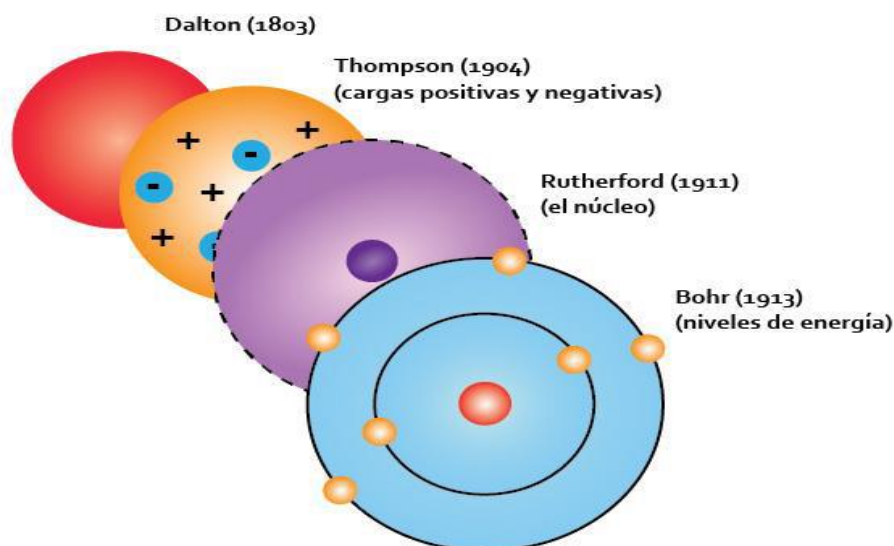
A principios del siglo XX, Bohr propuso un modelo planetario para explicar la estructura atómica: en el centro del átomo se encontraba el núcleo donde están los protones y los neutrones y rodeando dicho núcleo, los electrones giraban distribuidos en capas o niveles energéticos. Entre más cercanos estuvieran al núcleo, menor energía presentaba. Este modelo no explicaba algunos resultados experimentales y por ello, a finales de los 1920, Schrödinger y Heisenberg propusieron un modelo mecánico cuántico

Heisenberg decía que es imposible saber con exactitud la posición y la velocidad de un electrón en un momento dado (Principio de incertidumbre), por lo que se describieron “regiones estadísticas de mayor probabilidad electrónica” -rempe- que definen la posible posición de un electrón en determinado momento. Estas regiones también se conocen como orbitales atómicos y presentan algunos subniveles. La posición de un electrón puede definirse por 4 números cuánticos: n, l, m y s.

Modelo atómico de Bohr. I.

El electrón gira alrededor del núcleo en un conjunto fijo de órbitas permitidas, denominadas estados estacionarios: en ellos gira sin absorber ni emitir energía. $2 \cdot 2 e \cdot 2 v \cdot Ze \cdot m \cdot K \cdot r \cdot r =$ Postulados 2. Solo están permitidas aquellas órbitas en las cuales el momento angular del electrón es un múltiplo entero de $h/2\pi$. $2 e \cdot h \cdot m \cdot v \cdot r \cdot n \cdot \pi = 2 \cdot n \cdot 0 \cdot r \cdot n = 0 \cdot n \cdot 2 \cdot E \cdot E \cdot n = - \cdot r \cdot 0 =$ radio de la órbita más cercana al núcleo.

$E_0 =$ valor absoluto de la energía de la órbita más cercana al núcleo. h es La constante de Planck; k es la constante de la fuerza de Coulomb, Z es el número atómico del átomo, e es la carga del electrón, me es la masa del electrón, v es la velocidad del electrón en la órbita y r el radio de la órbita.



Modelo atómico de Bohr.

$2 n 0 r r n = 0 n 2 E E n = - r 0 =$ radio de la órbita más cercana al núcleo.

Radio de Bohr (0.53 Å). $E_0 =$ valor absoluto de la energía de la órbita más cercana al núcleo. Estado fundamental del átomo de hidrógeno (13.6 eV). $2 0 0 2 \dots e h r m Z e \epsilon \pi = 4 2 0 2 2 0 . . 8 . m e Z e E \epsilon h = - 10 3 .$

Los electrones pueden saltar de una órbita permitida a otra absorbiendo (si la órbita final está más alejada del núcleo) o emitiendo (si la órbita final está más cercana al núcleo) energía en forma de radiación electromagnética. $\Delta = E h \nu$

El modelo del átomo de Bohr fue incapaz de explicar lo siguiente:

- Los espectros de átomos más complejos que átomo de hidrógeno.
- Variación de la intensidad de las líneas espectrales.
- La disposición y la distribución de los electrones en varias órbitas.
- La estructura fina de las líneas espectrales de hidrógeno.
- Los efectos de Stark y Zeeman.
- n : es el número cuántico principal describe el nivel energético en el que está un electrón dado. Toma valores enteros (1, 2, 3...) y define el tamaño del orbital; cuanto mayor sea, mayor será el volumen.
- l : es el número cuántico del momento angular; hace referencia al subnivel energético. El valor del momento angular, indica la forma del orbital y el momento angular. $l = [desde 0 hasta (n - 1)]$

Para $l = 0$, orbitales s Para $l = 1$, orbitales p Para $l = 2$, orbitales d Para $l = 3$, orbitales f Para $l = 4$, orbitales g

- m : es el número cuántico magnético y describe la orientación del orbital en el espacio. $m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$
- s : es el número cuántico del espín electrónico y corresponde al giro del electrón. El valor del espín, puede ser $+1/2$ ó $-1/2$. Al orbital sin el valor de s se le llama orbital espacial, al orbital con el valor de s se le llama espín orbital.

Según el Principio de exclusión de Pauli, dos electrones no pueden tener los mismos números cuánticos.

Configuración electrónica

La disposición de los electrones en los diversos orbitales atómicos se conoce como configuración electrónica y cumple con algunas reglas básicas:

- un orbital no puede tener más de dos electrones, los cuales deben girar en direcciones opuestas.
- Los electrones no se juntan en un orbital si existe otro disponible con la misma energía.

Configuraciones electrónicas con kernell

Para simplificar una configuración electrónica se puede utilizar las notaciones kernell de los gases nobles y partir del gas noble cuyo número de electrones sea inmediato inferior al del átomo que va a representar. Por lo tanto tomando en cuenta esto; debemos tener presente la terminación de las configuraciones electrónicas de los gases nobles. Para representar las configuraciones electrónicas de kernell de los elementos químicos periodo dos (renglón dos) se utiliza el gas noble del periodo uno (renglón uno).

1.2. Representación de moléculas orgánicas a partir de estructuras de Lewis

1.2.1. Estructuras de Lewis y resonancia.

Es una estructura representativa de los electrones de valencia y los enlaces covalentes en una molécula o ion que sirve para tener una idea de su estructura molecular. No obstante, ésta estructura falla al predecir algunos detalles importantes como la geometría molecular respecto a un átomo y su entorno (si es cuadrada, plana trigonal, bipiramidal, etc.). Asimismo, no dice nada respecto a cuál es la

hibridación química de sus átomos, pero sí dónde se sitúan los dobles o triples enlaces y si existe resonancia en la estructura. Con esta información puede argumentarse sobre la reactividad de un compuesto, su estabilidad, el cómo y qué mecanismo seguirá la molécula cuando reaccione. Por esta razón las estructuras de Lewis nunca dejan de considerarse y son muy útiles, pues en ellas pueden condensarse los nuevos aprendizajes químicos.

¿Cómo se hace?

Para dibujar o bosquejar una estructura, fórmula o diagrama de Lewis es imprescindible la fórmula química del compuesto. Sin ella no se puede siquiera saber cuáles son los átomos que lo conforman. Una vez con ella se recurre a la tabla periódica para ubicar cuáles son los grupos a que pertenecen. Por ejemplo, si se tiene el compuesto $C_14O_2N_3$ entonces habría que buscar los grupos en donde está el carbono, el oxígeno y el nitrógeno. Hecho esto, sin importar cuál sea el compuesto, el número de electrones de valencia sigue siendo el mismo, por lo que tarde o temprano se memorizan. Así, el carbono pertenece al grupo IVA, el oxígeno al grupo VIA y el nitrógeno al VA. El número de grupo es igual a la cantidad de electrones (puntos) de valencia. Todos ellos tienen en común la tendencia de completar el octeto de la capa de valencia. Esto aplica para todos los elementos no metálicos o los que se encuentran en los bloques s o p de la tabla periódica. No obstante, no todos los elementos obedecen la regla del octeto. Casos particulares son los metales de transición, cuyas estructuras se fundamentan más en las cargas formales y su número de grupo.

Aplicando la fórmula matemática

Conociendo a qué grupo pertenecen los elementos, y por tanto, el número de electrones de valencia disponibles para formar enlaces, se procede con la siguiente fórmula, la cual resulta útil para dibujar las estructuras de Lewis:

$$C = N - D$$

Donde C significa electrones compartidos, es decir, aquellos que participan en los enlaces covalentes. Como cada enlace lo conforman dos electrones, entonces $C/2$ es igual al número de enlaces (o guiones) que deben dibujarse.

N son los electrones necesarios, los que debe tener el átomo en su capa de valencia para ser isoelectrónico al gas noble que le sigue en el mismo período. Para todos los elementos distintos del H (ya que requiere de dos electrones para compararse al He) necesitan de ocho electrones.

D son los electrones disponibles, los cuales vienen determinados por el grupo o los números de electrones de valencia. Así, como el Cl pertenece al grupo VIIA, debe rodearse de siete puntos negros o electrones, y tener en mente que se necesitan un par para formar un enlace.

Teniendo los átomos, sus puntos y el número de enlaces $C/2$, puede entonces improvisarse una estructura de Lewis. Pero adicionalmente, es necesario tener noción de otras “reglas”.

Dónde colocar los átomos menos electronegativos

Los átomos menos electronegativos en la gran mayoría de las estructuras ocupan los centros. Por esta razón, si se tiene un compuesto con átomos de P, O y F, el P debe por lo tanto situarse en el centro de la hipotética estructura. Asimismo, es importante resaltar que los hidrógenos normalmente se enlazan a los átomos muy electronegativos. Si se tiene en un compuesto Zn, H y O, el H irá junto al O y no con el Zn ($Zn-O-H$ y no $H-Zn-O$). Hay excepciones a esta regla, pero ocurre por lo general con átomos no metálicos.

Simetría y las cargas formales

La naturaleza tiene una alta preferencia por originar estructuras moleculares lo más simétricas posibles. Esto ayuda a evitar plantear estructuras desordenadas, con los átomos dispuestos de tal manera que no obedecen ningún patrón aparente. Por ejemplo, para el compuesto C_2A_3 , donde A es un átomo ficticio, la estructura más probable sería $A-C-A-C-A$. Nótese la simetría de sus lados, ambos reflejos del otro.

Las cargas formales también juegan un papel importante al momento de dibujar las estructuras de Lewis, sobre todo para la de los iones. Así, se pueden agregar o quitar enlaces de forma que la carga formal de un átomo corresponda a la carga total exhibida. Este criterio es de mucha ayuda para los compuestos de los metales de transición.

Limitaciones en la regla del octeto



No todas las reglas se cumplen, lo que no necesariamente significa que la estructura sea incorrecta. Ejemplos típicos de esto se observan en muchos compuestos donde intervienen elementos del grupo IIIA (B, Al, Ga, In, Tl). Aquí se considera específicamente el trifluoruro de aluminio (AlF_3).

Aplicando entonces la fórmula descrita anteriormente, se tiene:

$$D = 1 \times 3 \text{ (un átomo de aluminio)} + 7 \times 3 \text{ (tres átomos de flúor)} = 24 \text{ electrones}$$

Aquí el 3 y el 7 son los respectivos grupos o números de electrones de valencia disponibles para el aluminio y el flúor. Luego, considerando los electrones necesarios N:

$$N = 8 \times 1 \text{ (un átomo de aluminio)} + 8 \times 3 \text{ (tres átomos de flúor)} = 32 \text{ electrones}$$

Y por lo tanto los electrones compartidos son:

$$C = N - D$$

$$C = 32 - 24 = 8 \text{ electrones}$$

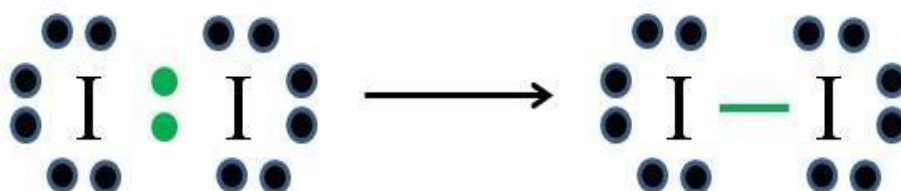
$$C/2 = 4 \text{ enlaces}$$

Dado que el aluminio es el átomo menos electronegativo debe colocarse en el centro, y el flúor sólo forma un enlace. Considerando esto se tiene la estructura de Lewis del AlF_3 . Los electrones compartidos están resaltados con puntos verdes para distinguirlos de los no compartidos.

Aunque los cálculos predicen que son 4 enlaces los que deben formarse, el aluminio carece de electrones suficientes y además no hay un cuarto átomo de flúor. Como resultado el aluminio no cumple con la regla del octeto y este hecho no se refleja en los cálculos.

Ejemplos de estructuras de Lewis

Yodo



El yodo es un halógeno y por tanto pertenece al grupo VIIA. Tiene entonces siete electrones de valencia, y esta simple molécula diatómica puede representarse improvisando o aplicando la fórmula:

$$D = 2 \times 7 \text{ (dos átomos de yodo)} = 14 \text{ electrones}$$

$$N = 2 \times 8 = 16 \text{ electrones}$$

$$C = 16 - 14 = 2 \text{ electrones}$$

$$C/2 = 1 \text{ enlace}$$

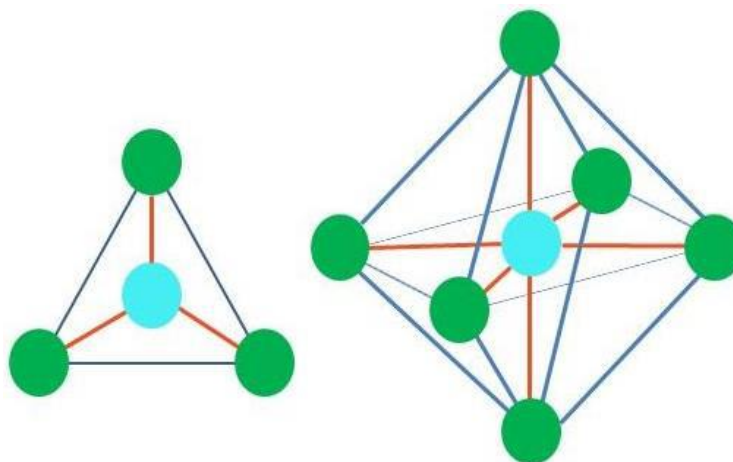
Como de 14 electrones 2 participan en el enlace covalente (puntos y guion verdes), 12 permanecen como no compartidos; y debido a que son dos átomos de yodo, 6 deben repartirse para uno de ellos (sus electrones de valencia). En esta molécula sólo es posible esta estructura, cuya geometría es lineal.

1.2.2. Geometría molecular a partir de estructuras de Lewis.

Geometría molecular: tipos y ejemplos

La geometría molecular o estructura molecular es la distribución espacial de los átomos alrededor de un átomo central. Los átomos representan regiones donde existe una alta densidad electrónica, y se consideran por tanto grupos electrónicos, sin importar los enlaces que formen (simples, dobles o

triples). Este concepto nace de la combinación y los datos experimentales de dos teorías: la del enlace de valencia (TEV) y la de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV). Mientras que la primera define los enlaces y sus ángulos, la segunda establece la geometría y, por consiguiente, la estructura molecular.



¿Qué formas geométricas son capaces de adoptar las moléculas?

Las dos teorías anteriores aportan las respuestas. De acuerdo a la RPECV, los átomos y pares de electrones libres deben disponerse en el espacio de tal manera que disminuyan al máximo la repulsión electrostática entre ellos. Entonces, las formas geométricas no son arbitrarias, sino que buscan el diseño más estable. Por ejemplo, en la imagen superior puede apreciarse a la izquierda un triángulo, y a la derecha un octaedro. Los puntos verdes representan los átomos y las franjas anaranjadas los enlaces.

En el triángulo, los tres puntos verdes se orientan en una separación de 120° . Este ángulo, que es igual al del enlace, permite que los átomos se repelan entre sí lo menor posible. Por lo tanto, una molécula con un átomo central unido a otros tres adoptará una geometría plano trigonal. Sin embargo, la RPECV predice que un par de electrones libre en el átomo central distorsionará la geometría. Para el caso del plano trigonal, este par empujará hacia abajo los tres puntos verdes, dando como consecuencia una geometría pirámide trigonal. Lo mismo también puede ocurrir con el octaedro de la imagen. En él todos los átomos se encuentran separados en la forma más estable posible.

¿Cómo saber con antelación la geometría molecular de un átomo X?

Para ello, es necesario considerar también los pares de electrones libres como grupos electrónicos. Estos, juntos a los átomos, definirán lo que se conoce como la geometría electrónica, la cual es compañera inseparable de la geometría molecular. A partir de la geometría electrónica, y habiendo detectado mediante la estructura de Lewis los pares de electrones libres, se puede establecer cuál será la geometría molecular. La sumatoria de todas las geometrías moleculares brindará un bosquejo de la estructura global.

Tipos

Como se aprecia en la imagen principal, la geometría molecular depende de cuántos átomos rodean al átomo central. Sin embargo, si están presentes un par de electrones sin compartir, éste modificará la geometría debido a que ocupa mucho volumen. Por lo tanto, ejerce un efecto estérico. De acuerdo a esto, la geometría puede presentar una serie de formas características para muchas moléculas. Y es aquí donde surgen los diferentes tipos de geometría molecular o estructura molecular.

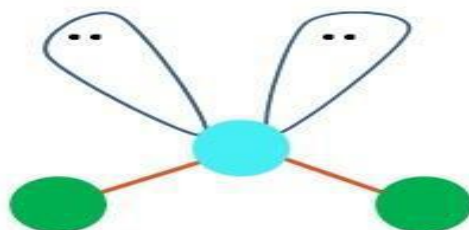
¿Cuándo la geometría es igual a la estructura?

Ambas denotan lo mismo únicamente en los casos donde la estructura no tenga más de un tipo de geometría; de lo contrario, deben considerarse todos los tipos presentes y darle a la estructura un nombre global (lineal, ramificada, globular, plana, etc.). Las geometrías son especialmente útiles para explicar la estructura de un sólido a partir de sus unidades estructurales.

Lineal

Todos los enlaces covalentes son direccionales, por lo que el enlace A-B es lineal. Pero, ¿será lineal la molécula AB₂? En caso afirmativo, la geometría se representa sencillamente como: B-A-B. Los dos átomos B están separados por un ángulo de 180°, y según la TEV, A debe tener orbitales híbridos sp.

Angular

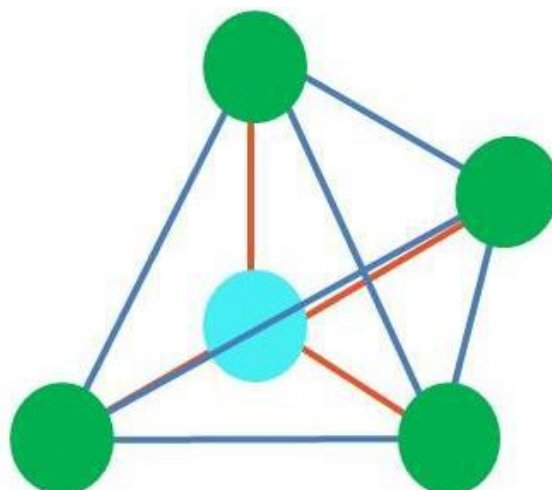


Se puede suponer en primera instancia una geometría lineal para la molécula AB_2 ; sin embargo, es primordial dibujar la estructura de Lewis antes de llegar a una conclusión. Dibujada la estructura de Lewis, se puede identificar el número de pares de electrones sin compartir ($:$) sobre el átomo de A. Cuando esto es así, encima de A los pares de electrones empujan los dos átomos de B hacia abajo, cambiando sus ángulos. Como resultado, la molécula lineal B-A-B termina convirtiéndose en una V, un boomerang o en una geometría angular (imagen superior). La molécula del agua, H-O-H, es el ejemplo ideal para este tipo de geometría. En el átomo de oxígeno hay dos pares de electrones sin compartir los cuales se orientan en un ángulo aproximado de 109° .

¿Por qué este ángulo?

Porque la geometría electrónica es tetraédrica, la cual posee cuatro vértices: dos para los átomos de H, y dos para los electrones. En la imagen superior nótese que los puntos verdes y los dos “lóbulos con ojos” dibujan un tetraedro con el punto azulado en su centro. Si el O no tuviera pares de electrones libre, el agua formaría una molécula lineal, su polaridad disminuiría y los océanos, mares, lagos, etc., probablemente no existirían tal como se conocen.

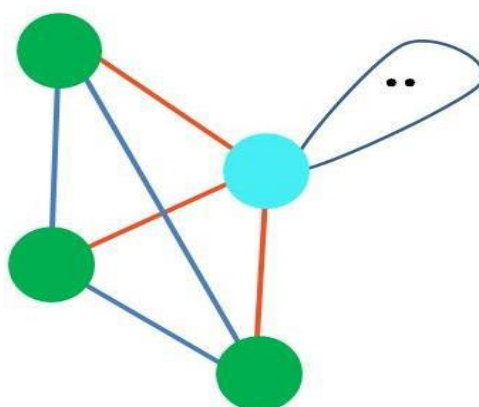
Tetraédrica



La imagen superior representa la geometría tetraédrica. Para la molécula del agua, su geometría electrónica es tetraédrica, pero al eliminar los pares libres de electrones puede notarse que se transforma en una geometría angular. Esto también se observa sencillamente al eliminar dos puntos verdes; los dos restantes dibujarán la V con el punto azul.

¿Y si en lugar de dos pares de electrones libres hubiera solo uno?

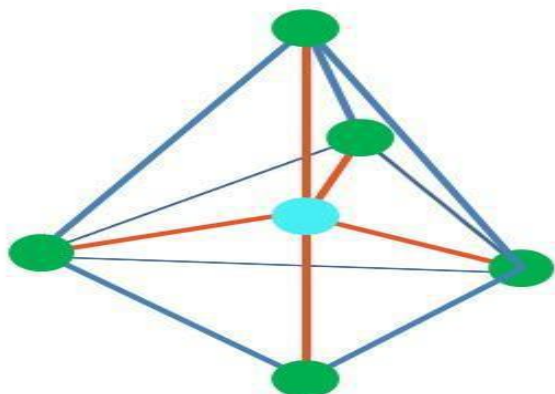
Entonces quedaría un plano trigonal (imagen principal). Sin embargo, al eliminar un grupo electrónico, no se evita el efecto estérico que produce el par de electrones libres. Por lo tanto, éste distorsiona el plano trigonal a una pirámide de base triangular:



Aunque la geometría molecular pirámide trigonal y tetraédrica sean distintas, la geometría electrónica es la misma: tetraédrica. ¿Entonces la pirámide trigonal no cuenta como geometría electrónica? La respuesta es no, puesto que es producto de la distorsión provocada por el “lóbulo con ojos” y su efecto estérico, y dicha geometría no toma en cuenta distorsiones posteriores.

Por esta razón, siempre es importante determinar primero la geometría electrónica con ayuda de las estructuras de Lewis antes de definir la geometría molecular. La molécula de amoníaco, NH_3 , es un ejemplo de geometría molecular pirámide trigonal, pero con geometría electrónica tetraédrica.

Bipirámide trigonal



Hasta ahora, a excepción de la geometría lineal, en la tetraédrica, la angular y la pirámide trigonal sus átomos centrales tienen hibridación sp^3 , según la TEV. Esto quiere decir que si se determinara experimentalmente sus ángulos de enlaces, éstos deberían ser alrededor de 109° . A partir de la geometría dipiramidal trigonal, son cinco los grupos electrónicos entorno al átomo central. En la imagen superior se puede apreciar con los cinco puntos verdes; tres en la base triangular, y dos en posiciones axiales, los cuales son los vértices superior e inferior de la pirámide.

¿Qué hibridación tiene entonces el punto azul?

Necesita de cinco orbitales híbridos para formar los enlaces simples (de color anaranjado). Esto lo logra a través de los cinco orbitales sp^3d (producto de la mezcla de un orbital s , tres p y un d). Al considerar cinco grupos electrónicos, la geometría es la ya expuesta, pero al haber pares de electrones sin compartir, ésta nuevamente sufre distorsiones que generan otras geometrías.

Asimismo, surge el siguiente interrogante: ¿dichos pares pueden ocupar cualquier posición de la pirámide? Estas son: la axial o la ecuatorial.

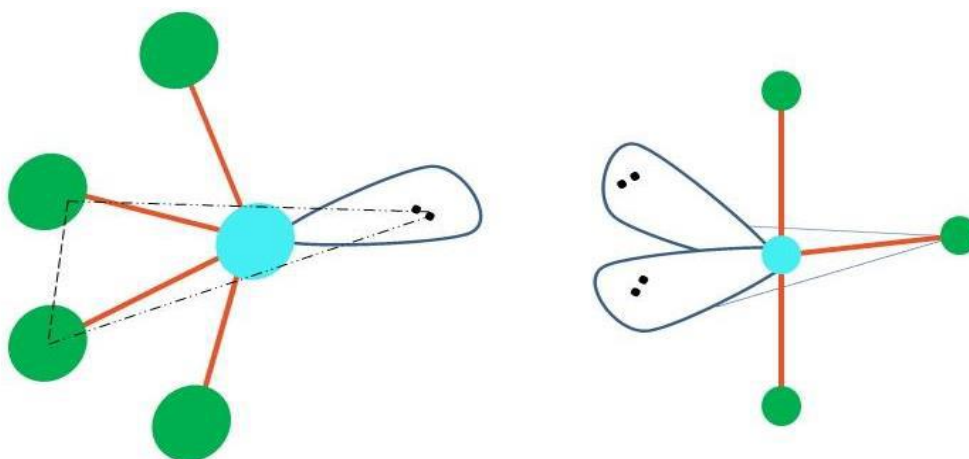
Posiciones axial y ecuatorial

Los puntos verdes que componen la base triangular están en posiciones ecuatoriales, mientras que los dos en los extremos superiores e inferiores, en posiciones axiales. ¿Dónde preferencialmente se

ubicará el par de electrones sin compartir? En aquella posición que disminuya al máximo la repulsión electrostática y el efecto estérico.

En posición axial el par de electrones haría “presión” perpendicularmente (90°) sobre la base triangular, mientras que si estuviera en posición ecuatorial, los dos restantes grupos electrónicos de la base estarían separados 120° y presionarían los dos extremos a 90° (en lugar de tres, como ocurre con la base). Por lo tanto, el átomo central buscará orientar sus pares libres de electrones en las posiciones ecuatoriales para generar geometrías moleculares más estables.

Oscilante y forma de T



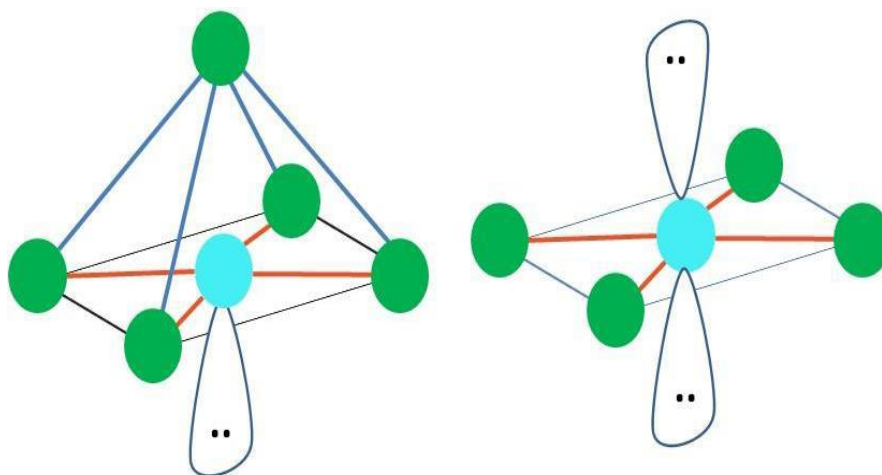
Si en la geometría bipirámide trigonal se sustituyera uno o más de sus átomos por pares libres de electrones, se tendría también distintas geometrías moleculares. A la izquierda de la imagen superior, la geometría cambia a la forma oscilante. En ella, el par libre de electrones empuja hacia una misma dirección el resto de los cuatro átomos, doblando sus enlaces hacia la izquierda. Nótese que este par y dos de los átomos yacen en el mismo plano triangular de la bipirámide original. Y a la derecha de la imagen, la geometría con forma de T.

Esta geometría molecular es el resultado de sustituir dos átomos por dos pares de electrones, trayendo como consecuencia que los tres átomos restantes se alineen en un mismo plano que dibuja exactamente una letra T. Entonces, para una molécula del tipo AB₅, ésta adopta la geometría bipirámide trigonal. No obstante, AB₄, con la misma geometría electrónica, adoptará la geometría oscilante; y AB₃, la geometría con forma de T. En todas ellas A tendrá (generalmente) hibridación sp³d.

Para determinar la geometría molecular es necesario dibujar la estructura de Lewis y por tanto su geometría electrónica. Si esta es bipirámide trigonal, se descartará entonces los pares libres de electrones, pero no sus efectos estéricos sobre el resto de los átomos. Así, se puede discernir perfectamente entre las tres geometrías moleculares posibles.

Octaédrica

A la derecha de la imagen principal se representa la geometría molecular octaédrica. Este tipo de geometría corresponde a los compuestos AB₆. AB₄ forman la base cuadrada, mientras que los dos B restante se posicionan en posiciones axiales. Así, se forman varios triángulos equiláteros, los cuales son las caras del octaedro. Aquí, nuevamente, puede haber (como en todas las geometrías electrónicas) pares de electrones libres, y por lo tanto, derivan de este hecho otras geometrías moleculares. Por ejemplo, AB₅ con geometría electrónica octaédrica consiste de una pirámide con base cuadrada, y AB₄ de un plano cuadrado:



Para el caso de la geometría electrónica octaédrica, estas dos geometrías moleculares son las más estables en términos de repulsión electrostática. En la geometría plano cuadrado los dos pares de electrones se encuentran separados 180°.

¿Cuál es la hibridación para el átomo A en dichas geometrías (o estructuras, si es la única)? Nuevamente, la TEV establece que es sp^3d^2 , seis orbitales híbridos, los cuales le permite a A orientar los grupos electrónicos en los vértices de un octaedro.

Otras geometrías moleculares

Modificando las bases de las pirámides mencionadas hasta ahora, pueden obtenerse algunas geometrías moleculares más complejas. Por ejemplo, la bipirámide pentagonal tiene por base un pentágono y los compuestos que la forman tienen fórmula general AB_7 . Al igual que las otras geometrías moleculares, sustituyendo los átomos de B por pares libres de electrones distorsionará la geometría a otras formas. Asimismo, los compuestos AB_8 pueden adoptar geometrías como la de anti prisma cuadrado. Algunas geometrías pueden llegar a ser muy complicadas, en especial para las fórmulas AB_7 en adelante (hasta AB_{12}).

Ejemplos

A continuación se mencionará una serie de compuestos para cada una de las principales geometrías moleculares. A manera de ejercicio, se podría dibujar las estructuras de Lewis para todos los ejemplos y certificar si, dada la geometría electrónica, se obtiene las geometrías moleculares tal como se enlistan abajo.

Geometría lineal

-Etileno, $H_2C \equiv CH_2$

Geometría angular

-El agua

Plana trigonal

-Trifluoruro de bromo, BF_3

Tetraédrica

-Gas metano, CH_4

Pirámide trigonal

-Amoníaco, NH_3

Bipirámide trigonal

-Pentafluoruro de fósforo, PF₅

Oscilante

Tetrafluoruro de azufre, SF₄

Forma de T

-Tricloruro de yodo, ICl₃

Octaédrica

Para culminar, la geometría molecular es la que explica las observaciones de las propiedades químicas o físicas de la materia. Sin embargo, se orienta de acuerdo a la geometría electrónica, de manera que esta última debe determinarse siempre antes que la primera.

1.2.3. Estructura y propiedades de las moléculas.

Influencia de la estructura sobre las propiedades moleculares Estas fuerzas intermoleculares influyen de la siguiente manera en las propiedades físicas de los compuestos orgánicos:

Puntos de ebullición. El punto de ebullición de un compuesto es la temperatura a la cual el compuesto líquido se convierte en gas. Para que un compuesto se vaporice, las fuerzas que mantienen las moléculas unidas unas a otras deben romperse. Esto significa que el punto de ebullición de un compuesto depende de la tracción entre las moléculas, de manera que, si las moléculas se mantienen unidas por fuertes fuerzas, se necesitará mucha energía para apartar las moléculas unas de otras y el compuesto tendrá el punto de ebullición muy alto. Por otra parte, si las fuerzas intermoleculares son débiles, una cantidad de energía relativamente baja será necesaria para separar las moléculas unas de otras, y el compuesto tendrá el punto de ebullición bajo.

Los alcanos tienen punto de ebullición relativamente bajo porque como se trata de moléculas polares las fuerzas intermoleculares que actúan son las de dispersión de London entre dipolos inducidos que son las más débiles. Además, estas fuerzas son mayores cuanto mayor es el área de contacto entre moléculas, por eso para moléculas lineales al aumentar el número de C (aumenta el peso molecular) el punto de ebullición también aumenta, sin embargo, para un mismo número de C la molécula

ramificada presenta un punto de ebullición menor que la lineal. En el caso de alcoholes, éteres... (Moléculas con heteroátomos) con cierto carácter polar, las fuerzas que intervienen son las dipolo-dipolo, más fuertes que las de London. Por tanto, sus puntos de ebullición serán mayores que los de los alcanos. En el caso de alcoholes y las aminas, además de estas fuerzas entre dipolos intervienen las fuerzas por puente de hidrógeno. Aunque cada puente de hidrógeno sólo supone 5 KJ/mol hay que pensar que hay al menos un puente de H por cada molécula.

Como el O es más electronegativo que el N el punto de ebullición de los alcoholes será mayor que el de las aminas.

Punto de fusión. Es la temperatura a la que un sólido se convierte en líquido. En este caso el factor que influye en el valor del punto de fusión es el empaquetamiento de las moléculas. El empaquetamiento determina como se acomodan las moléculas dentro de una red cristalina. Cuanto mejor se ajusten al cristal mayor energía será necesaria para romper la red y, por tanto, mayor será el punto de fusión.

Solubilidad. Además de afectar a los puntos de ebullición y de fusión, las fuerzas intermoleculares determinan la solubilidad de los compuestos orgánicos. La regla general es que lo semejante disuelve a lo semejante, las sustancias polares se disuelven en disolventes polares y las no polares en disolventes no polares.

Hay cuatro casos distintos a la hora de considerar los efectos de la polaridad sobre la solubilidad.

1) Un soluto polar con un disolvente polar, como la disolución del cloruro sódico (soluto polar) en agua (disolvente polar). Se necesita una gran cantidad de energía para separar los iones del cloruro sódico pero el agua puede separarlos porque los solvata. Es decir, las moléculas de agua rodean al ión con el extremo adecuado del dipolo del agua hacia el ión. En el caso del ión positivo, el Na^+ , el átomo de oxígeno de la molécula de agua es el que se acerca, mientras que los átomos de hidrógeno se acercan a los iones negativos cloruro (Cl^-). Como las moléculas de agua son muy polares se libera una gran cantidad de energía, que junto con el aumento de la entropía, compensa la energía necesaria para romper la red cristalina.

2) Un soluto polar con un disolvente no polar, como el cloruro sódico (soluto polar) en la gasolina (disolvente no polar). En este caso no se produce la disolución del soluto porque las moléculas no

polares de los hidrocarburos que constituyen las gasolinas no solvatan a los iones y no pueden superar la gran energía necesaria para romper la red cristalina

3) Un soluto no polar con un disolvente no polar, como la cera de parafina que se disuelve en gasolina. La cera de parafina está constituida por largas moléculas de hidrocarburo y por tanto son moléculas no polares que se atraen débilmente, y estas atracciones se compensan fácilmente con las atracciones de van der Waals con el disolvente. Aunque hay poco cambio energético cuando la sustancia no polar se disuelve en el disolvente no polar, hay un gran aumento de la entropía, que hace que el proceso sea favorable.

4) Un soluto no polar con un disolvente polar, como la cera de parafina y el agua. Las moléculas no polares sólo se atraen débilmente y se necesita poca energía para separarlas. El problema es que las moléculas de agua se atraen fuertemente entre sí, por puentes de hidrógeno. La molécula no polar debería desplazar a estos enlaces, pero casi no se libera energía de solvatación. La red de puentes de hidrógeno de las moléculas de agua excluye a las moléculas de parafina.

Acidez en las moléculas orgánicas.

Según la teoría de Arrhenius, desarrollada al final del siglo XIX, un ácido es una sustancia que se ioniza en disolución dando iones H^+ y una base es una sustancia que se ioniza en disolución generando aniones hidroxilos (OH^-). Esta definición ayudó a comprender el comportamiento de muchos ácidos y bases pero no explicaba la reactividad de otros compuestos, como el amoníaco NH_3 , que neutraliza a los ácidos pero no contiene una función hidroxilo en su fórmula molecular. En 1923 Brönsted y Löwry definieron un ácido como una sustancia capaz de ceder protones y una base como una sustancia capaz de aceptar protones.

Acidez en las moléculas orgánicas.

Según la teoría de Arrhenius, desarrollada al final del siglo XIX, un ácido es una sustancia que se ioniza en disolución dando iones H^+ y una base es una sustancia que se ioniza en disolución generando aniones hidroxilos (OH^-). Esta definición ayudó a comprender el comportamiento de muchos ácidos y bases pero no explicaba la reactividad de otros compuestos, como el amoníaco NH_3 , que neutraliza a los ácidos pero no contiene una función hidroxilo en su fórmula molecular. En 1923 Brönsted y Löwry definieron un ácido como una sustancia capaz de ceder protones y una base como una sustancia capaz de aceptar protones.

Efecto inductivo y fuerza ácida.

Un sustituyente que estabilice al anión carboxilato aumenta la disociación y produce un ácido más fuerte. Los átomos electronegativos aumentan la fuerza de un ácido porque su efecto inductivo electrón-atrayente contribuye a deslocalizar la carga negativa del anión carboxilato.

Este efecto inductivo puede ser muy grande si están presentes uno o más grupos electrón-atrayentes en el átomo de carbono α . Por ejemplo, el ácido cloroacético (ClCH_2COOH) tiene un pK_a de 2.86, lo que indica que es un ácido más fuerte que el acético ($\text{pK}_a = 4.74$). El ácido dicloroacético (Cl_2CHCOOH) es todavía más fuerte, con un pK_a de 1.26. El ácido tricloroacético (Cl_3CCOOH) tiene un pK_a de 0.64, comparable en fuerza a algunos de los ácidos minerales. La magnitud del efecto de un sustituyente depende de su distancia al grupo carboxilo. Los sustituyentes electrón-atrayentes en el carbono α son los más eficaces a la hora de aumentar la fuerza de un ácido. Los sustituyentes más alejados tienen efectos mucho más pequeños sobre la acidez, lo que pone de manifiesto que los efectos inductivos decrecen rápidamente con la distancia.

1.2.4. Modelo de repulsión del par electrónico de la capa de valencia.

MODELO DE REPULSIÓN DE PARES ELECTRÓNICOS EN LA CAPA DE VALENCIA. (RPECV).

Este modelo fue propuesto por R. J. Gillespie y R. S. Nyholm en 1957. Es extraordinariamente útil para predecir la estructura de cualquier molécula de fórmula general: AX_nS_m A = átomo central. X = átomos ligantes S = par de electrones no enlazante o solitario. Cubre satisfactoriamente una gran cantidad de casos, la siguiente es una cita de Gillespie:

El modelo RPECV parte de la idea como su nombre lo indica, de que los electrones alrededor de A están pareados (con espines opuestos). Los pares adquieren en el espacio una posición de tal que cada uno esté lo más alejado posible de los demás.

Una vez establecida la geometría de una molécula, pueden ser entendidas pequeñas diferencias en ángulos y distancias de enlace, reglas:

REGLA PRIMERA Una vez establecida la geometría de una molécula, pueden ser entendidas pequeñas diferencias en ángulo Los pares solitarios repelen a otros pares electrónicos cercano enlace.

REGLA SEGUNDA La repulsión entre pares de electrones compartidos decrece con el incremento de la electronegatividad del ligante, X.

REGLA TERCERA La repulsión de pares de electrones compartidos que forman parte de un enlace múltiple es mayor que la de pares de electrones compartidos de enlaces simples.

REGLA CUARTA Las repulsiones entre pares de electrones en capas llenas es mayor que aquella entre pares de electrones en capas incompletas.

REGLA QUINTA Cuando un átomo con una capa de valencia completa y uno o más pares de electrones solitarios se une a otro átomo que tiene su capa de valencia incompleta, se presenta la tendencia de los pares de electrones solitarios a transferirse parcialmente e la capa llena a la incompleta.

REGLA SEXTA En una capa de valencia que contenga cinco pares de electrones (donde no todos son equivalentes), aquellos que tengan mayor número de vecinos cercanos estarán a una distancia mayor que los otros.

1.2.5. Modelo del orbital molecular **Modelo del Orbital Molecular (OM).**

Este modelo considera que los electrones de una molécula ocupan orbitales moleculares, al igual que en un átomo los electrones ocupan orbitales atómicos.

En el átomo los electrones están bajo la influencia del núcleo atómico. La zona del espacio donde preferentemente viven, y por tanto su energía, depende del tipo de orbital en el que se encuentran. De modo análogo los electrones en una molécula se encuentran en orbitales moleculares con energía y "forma" diferentes. Los orbitales moleculares (o.m.) se generan por combinación lineal de orbitales atómicos (o.a.) de la misma simetría y de similar energía.

Ejemplo: los orbitales moleculares se forman por una combinación lineal de orbitales atómicos. Como los orbitales atómicos estaban definidos por una función de onda, las combinaciones entre ellos se tomarán como interferencias constructivas o destructivas.

Esto define tipos de orbitales moleculares enlazantes y antienlazantes.

- O.M. Enlazante
- Energía menor que el orbital de partida

- Interferencia constructiva
- Genera Enlace Químico
- O.M. Antienlazante
- Interferencia destructiva
- Energía mayor que el orbital de partida
- Orbital Antienlazante (densidad electrónica baja entre núcleos)

I.3. Tipos de enlaces existentes en compuestos orgánicos: Caracterización de cada uno de ellos de acuerdo a: Longitud de enlace, Angulo de enlace, energía de enlace.

Enlaces más débiles que el enlace covalente.

El enlace covalente es la unión que explica el mantenimiento de la unidad estructural de un compuesto orgánico. Además de este enlace intermolecular se pueden dar entre las moléculas una serie de interacciones, mucho más débiles que el enlace covalente, pero que a menudo son las responsables de las propiedades físicas de los compuestos orgánicos.

Este tipo de interacciones intermoleculares son de especial importancia en el estado sólido y líquido, ya que las moléculas están en contacto continuo. Los puntos de fusión, de ebullición y las solubilidades de los compuestos orgánicos muestran los efectos de estas fuerzas. Hay tres tipos principales de interacciones intermoleculares que hacen que las moléculas se asocien para formar sólidos y líquidos: las fuerzas entre dipolos de las moléculas polares, las fuerzas de London que afectan a todas las moléculas, y los puentes de hidrógeno que atraen moléculas que tienen grupos OH y NH.

I.4. Polaridad de las moléculas.

¿Por qué el agua se mezcla homogéneamente con el alcohol y no es capaz de mezclarse con el aceite? La solubilidad es una propiedad física que se relaciona directamente con la polaridad de las moléculas. En esta parte, aprenderemos a establecer si una molécula es polar o no polar (apolar). La polaridad es una propiedad de las moléculas que representa la separación de las cargas eléctricas dentro de la molécula, según el número y tipo de enlaces que posea. El enlace covalente entre dos átomos puede

ser polar o apolar. Esto depende del tipo de átomos que lo conforman: si los átomos son iguales, el enlace será apolar (ya que ningún átomo atrae con más fuerza los electrones). Pero, si los átomos son diferentes, el enlace estará polarizado hacia el átomo más electronegativo, ya que será el que atraiga el par de electrones con más fuerza.

Consideremos el enlace H-H y H-F:

Vemos que en el enlace H-H ningún átomo es más electronegativo que el otro. Por tanto, el par de electrones no se polariza y podemos decir que el momento dipolar (μ) es cero. En el caso del enlace H-F, el flúor es más electronegativo que el hidrógeno. Por tanto, el par de electrones se siente atraído hacia el flúor. Podemos representar esta polarización del enlace por medio de una flecha, que SIEMPRE apunta al átomo más electronegativo. En el caso del H-F, el momento dipolar (μ) es diferente de cero.

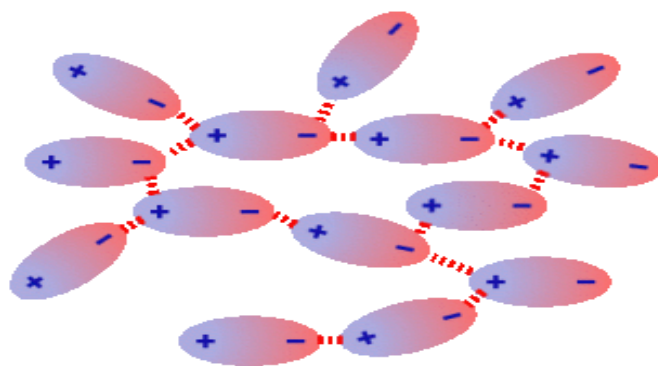
1.4.1. Momento dipolar.

El momento dipolar es una medida cuantitativa de la polaridad de una molécula. En presencia de un campo eléctrico, aquellas moléculas polares (es decir, aquellas con un momento dipolar diferente a cero) son alineadas en la dirección del campo, mientras que las moléculas apolares no se ven afectadas.

En el caso de moléculas con más de dos átomos, el momento dipolar dependerá de la polaridad de todos sus enlaces y de la geometría molecular. La presencia de enlaces polares NO IMPLICA necesariamente que la molécula sea polar.

1.5. Interacciones moleculares

Interacciones moleculares



1. Atracción dipolo-dipolo: fuerzas que se producen entre dos o más moléculas polares, por atracción entre cargas parciales positivas y negativas (Foto). Ejemplo puente de Hidrógeno.
2. Atracción ión-dipolo: fuerza entre un ión positivo o negativa y una molécula polar.
3. Fuerzas de Van de Waals (fuerzas de London): son atracciones débiles entre moléculas no polares. Se producen cuando estas moléculas no tienen polos y son inducidas a provocar un desplazamiento momentáneo de los electrones, generando un polo positivo y uno negativo, gracias al cual se sienten atraídas.

1.5.1. Fuerzas dipolo dipolo

Fuerzas entre dipolos. La mayor parte de las moléculas tienen momentos bipolares permanentes como resultado de sus enlaces polares. Cada momento bipolar molecular tiene un extremo positivo y otro negativo. La situación más estable es la que presenta el extremo positivo cerca del extremo negativo de otra molécula. Las moléculas pueden girar y orientarse hacia la situación más estable que es en la orientación positivo-negativo. Las fuerzas entre dipolo-dipolo son fuerzas de atracción intermolecular.

Estos dipolos temporales solo duran una fracción de segundo y cambian continuamente. Sin embargo, se correlacionan de forma que su fuerza neta es de atracción. Esta fuerza de atracción depende del contacto superficial entre las moléculas y por tanto es proporcional al área molecular. El CCl_4 tiene un área superficial mayor que la del cloroformo (CHCl_3) ya que un átomo de cloro es mayor que un átomo de hidrógeno las fuerzas intermoleculares entre las moléculas de CCl_4 son más fuertes que las que aparecen entre las moléculas de CHCl_3 . Las fuerzas de Van der Waals son fuerzas de atracción intermolecular entre dipolos, sean éstos permanentes o inducidos. Son fuerzas de tipo electrostático que unen a las moléculas tanto polares como apolares. Su valor oscila entre 0.1 y 35 KJ/mol.

1.5.2. Puente de hidrógeno.

Un puente de hidrógeno no es un enlace verdadero sino una forma especialmente fuerte de atracción entre dipolos. Un átomo de hidrógeno puede participar en un puente de hidrógeno si está unido a oxígeno, nitrógeno o flúor, porque los enlaces O-H, N-H y F-H están muy polarizados dejando al átomo de hidrógeno con una carga parcial positiva. Este átomo de hidrógeno tiene una gran afinidad hacia electrones no compartidos y forma agregados intermoleculares con los electrones no compartidos de los átomos de oxígeno, nitrógeno y flúor.

1.5.3. Fuerzas intermoleculares:

Para entender por qué las moléculas de un gas enfriado se convierten en un líquido, debemos considerar la naturaleza de estas fuerzas de atracción entre las moléculas (y átomos). Las atracciones entre moléculas se llaman Fuerzas Intermoleculares. Existen otros tipos de atracciones llamadas intermoleculares que son las fuerzas responsables de la unión de los átomos dentro de una molécula.

Las fuerzas intermoleculares no son tan fuertes como las fuerzas intramoleculares, así por ejemplo, se requieren 41 kJ para vaporizar un 1 mol de agua (inter) y 930 kJ para romper todos los enlaces O-H en 1 mol de agua (intra). La intensidad de las fuerzas intermoleculares disminuye drásticamente al aumentar la distancia entre las moléculas, por ello en los gases no tienen tanta importancia. Muchas propiedades de los líquidos, incluido su punto de ebullición, reflejan la intensidad de las fuerzas intermoleculares.

Existen tres tipos de fuerzas de atracción entre moléculas:

- Fuerzas de dispersión de London
- Fuerzas dipolo - dipolo
- Fuerzas de puente de hidrógeno (enlace de hidrógeno)

Otro tipo de fuerza de atracción es la fuerza ion-dipolo, que juega un papel importante en las soluciones.

El orden de magnitud relativa de las fuerzas intermoleculares es:

Enlace de hidrógeno > dipolo – dipolo > dispersión de London

Fuerzas de dispersión de London

¿Pueden existir fuerzas intermoleculares entre moléculas no polares?

Si experimentalmente se consigue licuar los gases no polares, entonces, ¿qué fuerzas son las que actúan sobre las moléculas no polares? Debe existir alguna fuerza que produzca la suficiente atracción para que las moléculas se mantengan unidas entre sí en el estado líquido.

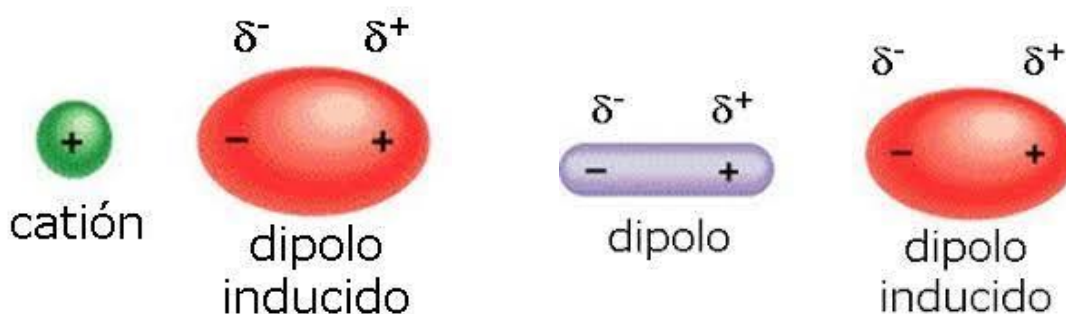
¿Qué fuerzas pueden existir entre átomos y moléculas no polares?

Se denomina polarizabilidad, a la facilidad con que la distribución electrónica de un átomo o molécula, puede distorsionarse por acción de un campo eléctrico externo. El primero en establecer qué tipo de fuerzas de atracción actuaban sobre los gases no polares, que les permitía licuarse, fue Fritz London (1930), quien estableció que: "el movimiento de los electrones en un átomo o molécula, puede crear un momento dipolar instantáneo, suficiente para producir la atracción".

En un átomo o molécula apolar, debido al movimiento de los electrones, en algún instante hay más e^- hacia un lado, que al estar cerca de otro átomo o molécula, los electrones del segundo son repelidos, originándose dos dipolos instantáneos, que originan una fuerza de atracción. Los electrones de ambos átomos o moléculas, continúan moviéndose juntos, de modo que se produce una fuerza de atracción.

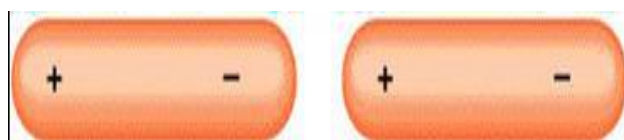
Por lo tanto, la polarizabilidad es la medida de la capacidad de distorsión de la nube electrónica, dentro de un átomo o molécula, originando la formación de un dipolo momentáneo.

Un átomo o una molécula, puede distorsionar su nube electrónica ante la presencia de un ion o de un dipolo, originando un dipolo inducido:

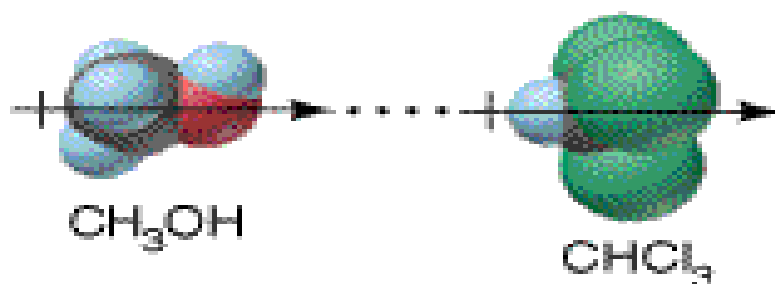


La polarizabilidad se incrementa cuando: hay presencia de gran número de electrones, la nube electrónica es muy difusa, es decir las moléculas y átomos de mayor peso molecular, son más polarizables. Los dipolos formados por las fuerzas de London, en moléculas apolares, existen en forma momentánea, cambiando rápidamente de magnitud y de dirección.

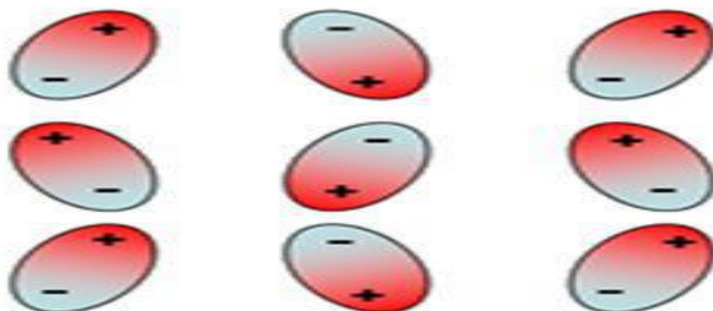
- Las fuerzas de dispersión de London están presentes en todas las moléculas, sean polares o apolares.
- Fuerzas dipolo - dipolo
- Para que existan fuerzas de atracción dipolo-dipolo deben estar presentes moléculas polares.
- Las moléculas polares se atraen cuando el extremo positivo de una de ellas está cerca del extremo negativo de la otra:
- Interacción electrostática de dos moléculas polares, (dipolos):



dipolo-dipolo



Interacción de muchos dipolos:



Las fuerzas dipolo-dipolo son generalmente más débiles que las fuerzas ión - dipolo.

En moléculas con masas y tamaños aproximados, la intensidad de las fuerzas dipolo-dipolo aumenta al incrementarse la polaridad (aumenta el momento dipolar).

1.5.4. Fuerzas de Vander Waal.

Las fuerzas de Van der Waals son fuerzas de atracción intermolecular entre dipolos, sean éstos permanentes o inducidos. Son fuerzas de tipo electrostático que unen a las moléculas tanto polares como apolares. Su valor oscila entre 0.1 y 35 KJ/mol. En química física, la fuerza de van der Waals (o interacción de van der Waals), denominada así en honor al científico holandés Johannes Diderik van der Waals, es la fuerza atractiva o repulsiva entre moléculas (o entre partes de una misma molécula) distintas a aquellas debidas al enlace covalente o a la interacción electrostática de iones con otros o con moléculas neutras.

El término incluye:

- fuerzas dipolo permanente-dipolo permanente (fuerzas de Keesom)
- fuerzas dipolo permanente-dipolo inducido (fuerzas de Debye)
- fuerzas dipolo inducido instantáneo-dipolo inducido (fuerzas de dispersión de London)

También se usa en ocasiones como un sinónimo para la totalidad de las fuerzas intermoleculares. Las fuerzas de van der Waals son relativamente débiles comparadas con los enlaces químicos normales, pero juegan un rol fundamental en campos tan diversos como química supramolecular, biología estructural, ciencia de polímeros, nanotecnología, ciencia de superficies, y física de materia condensada.

Las fuerzas de van der Waals definen el carácter químico de muchos compuestos orgánicos. También definen la solubilidad de sustancias orgánicas en medios polares y no polares. En los alcoholes inferiores, las propiedades del grupo polar hidróxilo dominan a las débiles fuerzas intermoleculares de van der Waals. En los alcoholes superiores, las propiedades del radical alquílico apolar (R) dominan y definen la solubilidad. Las fuerzas de van der Waals crecen con la longitud de la parte no polar de la sustancia.

Las fuerzas de van der Waals incluyen atracciones entre átomos, moléculas, y superficies. Difieren del enlace covalente y del enlace iónico en que están causados por correlaciones en las polarizaciones fluctuantes de partículas cercanas (una consecuencia de la dinámica cuántica). Las fuerzas intermoleculares tienen cuatro contribuciones importantes. En general, un potencial intermolecular tiene un componente repulsivo (que evita el colapso de las moléculas debido a que al acercarse las entidades unas a otras las repulsiones dominan).

También tiene un componente atractivo que, a su vez, consiste de tres contribuciones distintas:

1. La primera fuente de atracción es la interacción electrostática, también denominada interacción de Keesom o fuerza de Keesom, en honor a Willem Hendrik Keesom.
2. La segunda fuente de atracción es la inducción (también denominada polarización), que es la interacción entre un dipolo permanente en una molécula, con un multipolo inducido en otra. Esta interacción se mide algunas veces en debyes, en honor a Peter Debye.
3. La tercera atracción suele ser denominada en honor a Fritz London que la denominaba dispersión. Es la única atracción experimentada por átomos no polares, pero opera entre cualquier par de moléculas, sin importar su simetría. Todas las fuerzas intermoleculares de van der Waals presentan anisotropía (excepto aquellas entre átomos de dos gases nobles), lo que significa que dependen de la orientación relativa de las moléculas. Las interacciones de inducción y dispersión son siempre atractivas, sin importar su orientación, pero el signo de la interacción cambia con la rotación de las moléculas. Esto es, la fuerza electrostática puede ser atractiva o repulsiva, dependiendo de la orientación mutua de las moléculas.

Cuando las moléculas tienen movimiento térmico, como cuando están en fase gaseosa o líquida, la fuerza electrostática se reduce significativamente, debido a que las moléculas rotan térmicamente y experimentan las partes repulsiva y atractiva de la fuerza electrostática. Algunas veces, este efecto se expresa indicando que el “movimiento térmico aleatorio a temperatura ambiente puede imponerlo o

anularlo” (refiriéndose al componente electrostático de la fuerza de van der Waals). Claramente, el efecto térmico promedio es mucho menos pronunciado para las fuerzas atractivas de inducción y dispersión

1.6. Fuerzas electrostáticas.

La fuerza electromagnética es la interacción que se da entre cuerpos que poseen carga eléctrica. Es una de las cuatro fuerzas fundamentales de la Naturaleza. Cuando las cargas están en reposo, la interacción entre ellas se denomina fuerza electrostática. Dependiendo del signo de las cargas que interaccionan, la fuerza electrostática puede ser atractiva o repulsiva. La interacción entre cargas en movimiento da lugar a los fenómenos magnéticos.

Históricamente los fenómenos eléctricos y magnéticos se descubrieron y estudiaron de forma independiente, hasta que en 1861 James Clerk Maxwell unificó todos ellos en las cuatro ecuaciones que llevan su nombre. Por simplicidad, en estas páginas trataremos por separado los fenómenos eléctricos y magnéticos.

En el Sistema Internacional, la unidad de carga eléctrica es el Culombio (C). Un Culombio es la cantidad de carga que pasa por la sección transversal de un conductor eléctrico en un segundo, cuando la corriente eléctrica es de un amperio.

La carga eléctrica es una propiedad fundamental de la materia que poseen algunas partículas subatómicas. Esta carga puede ser positiva o negativa. Todos los átomos están formados por protones (de carga positiva) y electrones (de carga negativa). En general, los átomos son neutros, es decir, tienen el mismo número de electrones que de protones. Cuando un cuerpo está cargado, los átomos que lo constituyen tienen un defecto o un exceso de electrones.

La carga eléctrica es discreta, y la unidad elemental de carga es la que porta un electrón. En el Sistema Internacional, la carga del electrón es:

$$e = -1.602 \times 10^{-19} \text{C}$$

La carga del electrón es una constante física fundamental. El protón tiene la misma cantidad de carga que un electrón pero con signo opuesto.

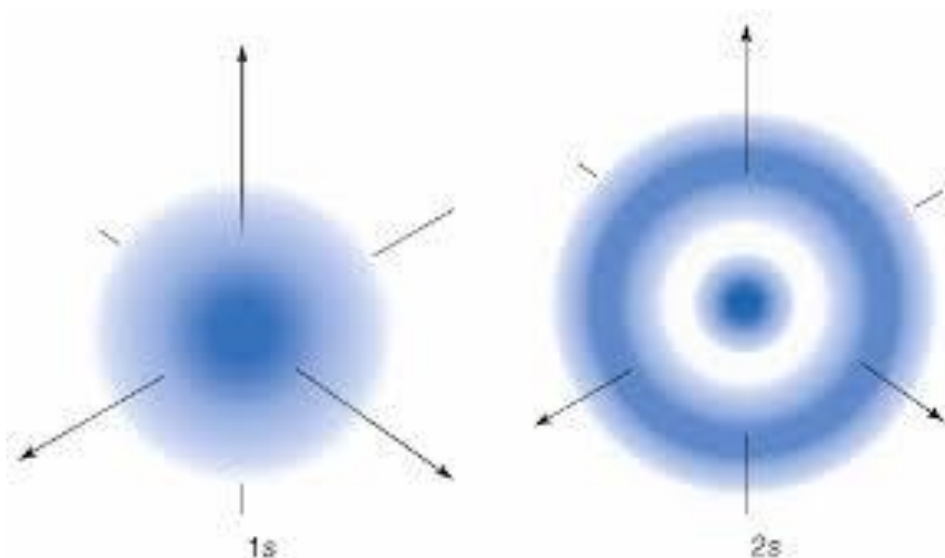
La carga eléctrica está cuantizada, por lo que, cuando un objeto (o partícula, a excepción de los quarks) está cargado, su carga es un múltiplo entero de la carga del electrón.

El concepto de electrón (carga elemental indivisible) fue introducido en el siglo XIX para explicar las propiedades químicas de los átomos. Desde entonces hasta principios del siglo XX se propusieron distintos modelos atómicos. Tanto en el modelo de Rutherford como en el de Bohr, los electrones son partículas que giran en torno al núcleo, por lo que el átomo es un sistema solar en miniatura.

Con el descubrimiento de la mecánica cuántica se desarrolló una ecuación (la ecuación de Schrödinger, equivalente a la segunda ley de Newton en Mecánica Clásica) que permite calcular la función de onda asociada a un electrón. Éste ya no es una partícula con una posición bien definida, sino que lo que podemos determinar es la probabilidad de encontrar un electrón cerca de una cierta posición r del espacio. Esta probabilidad es el cuadrado de la función de onda.

Las soluciones de la ecuación de Schrödinger están cuantizadas, dependiendo sus soluciones de una serie de números cuánticos relacionados con su energía, con su momento angular y con su spin.

En la siguiente figura está representado el orbital $1s$ de un electrón en el átomo de hidrógeno, que es su estado de más baja energía, denominado estado fundamental:



A lo largo de estas páginas trataremos los fenómenos asociados a dos tipos de objetos cargados: cargas puntuales y distribuciones continuas de carga.

Una carga puntual es una carga eléctrica localizada en un punto sin dimensiones. Este concepto es una idealización, y resultará muy útil a la hora de estudiar los fenómenos eléctricos. Una distribución continua de carga es un objeto cargado cuyas dimensiones no son despreciables. Los fenómenos eléctricos producidos por distribuciones de carga son más complicados de analizar, aunque trataremos algunos sistemas sencillos.

1.6.1. Grupos funcionales.

GRUPOS FUNCIONALES

Las propiedades de los compuestos de carbono dependen del arreglo de sus cadenas y tipos de átomos a los que están unidos, esto es, a su estructura. Un grupo funcional es un átomo o un arreglo de átomos que siempre reaccionan de una forma determinada; además, es la parte de la molécula responsable de su comportamiento químico ya que le confiere propiedades características. Muchos compuestos orgánicos contienen más de un grupo funcional.

En el siguiente fichero se presentan ejemplos sencillos de cada grupo funcional y su estructura con base en el modelo de "esferas y palos". Observa cómo se forman los enlaces entre los átomos. Las

moléculas biológicas grandes generalmente están compuestas por un esqueleto de carbono (formado por átomos de carbono e hidrógeno) y algunos otros átomos, incluyendo oxígeno, nitrógeno o azufre. A menudo, estos átomos adicionales aparecen en el contexto de grupos funcionales. Los grupos funcionales son motivos químicos o patrones de átomos que muestran una "función" consistente (propiedades y reactividad) independientemente de la molécula exacta en la que se encuentran. Las moléculas biológicas pueden contener muchos tipos y combinaciones diferentes de grupos funcionales, y el conjunto particular de grupos de una biomolécula afectará muchas de sus propiedades, incluida su estructura, solubilidad y reactividad.

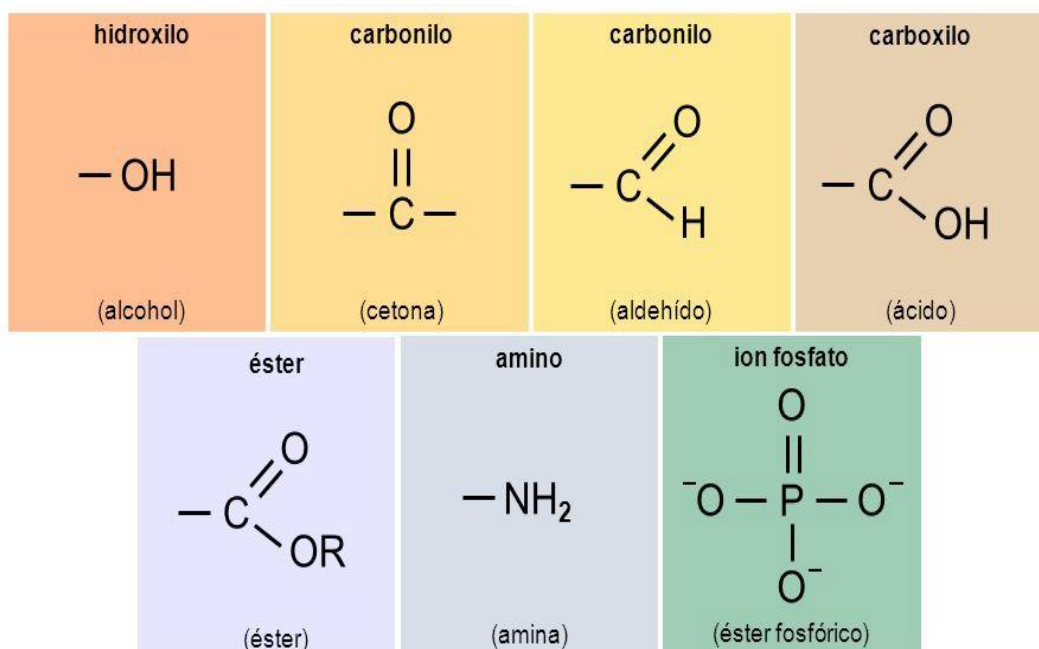
En la siguiente tabla se muestran algunos de los grupos funcionales más importantes en moléculas biológicas. Los grupos funcionales se pueden clasificar como hidrofóbicos o hidrofílicos por sus características de carga y polaridad. El único grupo hidrofóbico que se muestra abajo es el grupo metilo, que es no polar. Los otros seis grupos funcionales restantes en la tabla tienen diferentes grados de carácter hidrofílico.

Un ejemplo de un grupo fuertemente hidrófilo es el grupo carboxilo (COOH), que puede actuar como un ácido y perder un protón para formar un ion carboxilato cargado negativamente (COO^-). Los grupos carboxilo se encuentran comúnmente en aminoácidos, ácidos grasos y otras biomoléculas. Un ejemplo de un grupo menos hidrófilo es el grupo carbonilo (C=O), un grupo funcional sin carga pero polar (que contiene cargas positivas parciales y negativas parciales). Los carbonilos se encuentran en muchas moléculas biológicas diferentes, que incluyen proteínas, péptidos y carbohidratos.

Grupos funcionales comunes en biología

BIOMOLÉCULAS ORGÁNICAS

Grupos funcionales de compuestos orgánicos



1.6.2. Polaridad de los grupos funcionales.

El enlace covalente entre dos átomos puede ser polar o apolar. Esto depende del tipo de átomos que lo conforman: si los átomos son iguales, el enlace será apolar (ya que ningún átomo atrae con más fuerza los electrones). Pero, si los átomos son diferentes, el enlace estará polarizado hacia el átomo más electronegativo, ya que será el que atraiga el par de electrones con más fuerza. Consideremos el enlace H-H y H-F:

Vemos que en el enlace H-H ningún átomo es más electronegativo que el otro. Por tanto, el par de electrones no se polariza y podemos decir que el momento dipolar (μ) es cero. En el caso del enlace

H-F, el flúor es más electronegativo que el hidrógeno. Por tanto, el par de electrones se siente atraído hacia el flúor. Podemos representar esta polarización del enlace por medio de una flecha, que SIEMPRE apunta al átomo más electronegativo. En el caso del H-F, el momento dipolar (μ) es diferente de cero.

El momento dipolar es una medida cuantitativa de la polaridad de una molécula. En presencia de un campo eléctrico, aquellas moléculas polares (es decir, aquellas con un momento dipolar diferente a cero) son alineadas en la dirección del campo, mientras que las moléculas apolares no se ven afectadas. En el caso de moléculas con más de dos átomos, el momento dipolar dependerá de la polaridad de todos sus enlaces y de la geometría molecular. La presencia de enlaces polares NO IMPLICA necesariamente que la molécula sea polar.

Existen enlaces con polaridad muy variada. En los ejemplos siguientes, el etano tiene un enlace covalente no polar C-C. La metilamina, el metanol y el clorometano tienen enlaces covalentes cada vez más polares (C-N, C-O y C-Cl). El cloruro de metilamonio ($\text{CH}_3\text{NH}_3^+\text{Cl}^-$) tiene un enlace iónico entre el ión metilamonio y el ión cloruro.

- La polaridad de un enlace aumenta a medida que la electronegatividad de uno de los átomos implicados en un enlace covalente aumenta.
- El momento dipolar del enlace es una medida de la polaridad de un enlace.

Cuando dos átomos comparten por igual los dos electrones del enlace covalente se dice que el enlace es no polar, como el enlace de la molécula de hidrógeno o el enlace carbono carbono del etano. La mayor parte de los enlaces covalentes están formados por dos átomos diferentes, de manera que los electrones del enlace son atraídos con mayor intensidad por uno de los dos átomos que forman el enlace. Cuando esto ocurre el enlace covalente se denomina enlace polar. Por ejemplo, cuando el carbono se enlaza al cloro el par de electrones del enlace se encuentra atraído con más intensidad por el átomo de cloro, de manera que sobre el átomo de carbono aparece una pequeña carga parcial positiva y sobre el átomo de cloro aparece una cantidad igual de carga negativa. En la siguiente figura se indica el enlace covalente polar C-Cl de la molécula de clorometano. La polaridad del enlace se indica con una flecha que dirige su punta hacia el extremo negativo del enlace polar y un signo más en el extremo positivo del enlace.

La polaridad del enlace se mide mediante su momento dipolar (m) que se define como la cantidad de diferencia de carga multiplicada por la longitud del enlace. El símbolo δ^+ quiere decir una pequeña cantidad de carga positiva y el símbolo δ^- quiere decir una pequeña cantidad de carga negativa. A fin de predecir si un enlace covalente va a ser polar se recurre a la comparación de las electronegatividades de los átomos que forman el enlace. La electronegatividad se define como la tendencia del núcleo atómico a la atracción de electrones.

Pauling desarrolló una escala de electronegatividades relativas para la mayoría de los átomos. En el Sistema Periódico la electronegatividad aumenta de izquierda a derecha y disminuye al bajar en una columna, por lo que el flúor es el elemento más electronegativo. A continuación, se da una tabla de electronegatividades para los principales átomos de interés en Química Orgánica

En un enlace covalente el átomo con mayor electronegatividad es el extremo negativo del dipolo, tal y como se indica en las siguientes estructuras.

Grupos Funcionales			
R = cadena alifática con cualquier número de carbonos			
Nombre del Grupo Funcional	Estructura General	Estructura Ejemplo	Nombre Gráfico
Alcano	$\begin{array}{c} \\ -\text{C}- \\ \end{array}$	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_3$	propano
Alqueno	$\begin{array}{c} \diagup \\ \text{C}=\text{C} \\ \diagdown \end{array}$	$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_3$	propeno
Alquino	$-\text{C}\equiv\text{C}-$	$\text{CH}_2\equiv\text{C}-\text{CH}_3$	propino
Alcohol	$\text{R}-\text{OH}$	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH}$	propanol
Éter	$\text{R}-\text{O}-\text{R}$	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$	diel éter
Aldehído	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{R}-\text{C}-\text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH} \end{array}$	propanal
Cetona	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{R}-\text{C}-\text{R} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CH}_3 \end{array}$	Propanona o acetona (o metil cetona -dimetil cetona es redundante-)
Acido carboxílico	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{R}-\text{C}-\text{OH} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{OH} \end{array}$	etanoico o ácido acético
Ester	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{R}-\text{O}-\text{C}-\text{R} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{CH}_3-\text{O}-\text{C}-\text{CH}_3 \end{array}$	etanoato de metilo o acetato de metilo
Amina	$\text{R}-\text{NH}_2$ o $\text{R}-\text{NH}-\text{R}$	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{NH}_2$	propilamina
Amida	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{O} \\ \quad \\ \text{R}-\text{N}-\text{C}-\text{R} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{O} \\ \quad \\ \text{CH}_3-\text{N}-\text{C}-\text{CH}_3 \end{array}$	metil etanamida o metil etil amida

UNIDAD II

NOMENCLATURA DE COMPUESTOS ORGANICOS COMUN Y SISTEMÁTICA

2.1. Nomenclatura de hidrocarburos.

Ciertos compuestos orgánicos sólo contienen dos elementos, hidrógeno y carbono, por lo que se conocen como hidrocarburos. Partiendo de su estructura, se dividen en dos clases principales: alifáticos y aromáticos. Los primeros se subdividen en familias: alcanos, alquenos, alquinos y sus análogos cíclicos (cicloalcanos, etc.). El miembro más simple de la familia de los alcanos, y de hecho uno de los compuestos orgánicos más simples, es el metano, CH_4 .

2.2. Clasificación de los hidrocarburos.

Los hidrocarburos se pueden clasificar en dos tipos: alifáticos y aromáticos. Los alifáticos se pueden clasificar a su vez en alcanos, alquenos y alquinos según los tipos de enlace que unen entre sí los átomos de carbono.

Existen dos series principales de hidrocarburos y cada una se subdivide en varias clases:

Hidrocarburos aromáticos, los cuales tienen al menos un anillo aromático (conjunto planar de seis átomos de carbono), agrupándose en estas las clases: hidrocarburos aromáticos Monocíclicos, que contienen un solo núcleo bencénico y policíclicos, que contienen dos o más núcleos bencénicos.

Hidrocarburos alifáticos, se unen en cadenas abiertas, ya sea lineales o ramificadas, dentro de esta serie las clases son:

- Alcanos (parafinas),
- Alquenos (oleofinas),
- Alquinos (acetilenos) y
- Cicloalcanos.

Hidrocarburos saturados, todos los enlaces entre los átomos de carbono son simples, también son conocidos como alcanos.

Hidrocarburos no saturados, tienen uno o más enlaces dobles o triples entre los átomos de carbono. Según los enlaces sean dobles o triples se los clasifica en: alquenos aquellos que contienen uno o más enlaces dobles alquinos los que contienen uno o más enlaces triples.

2.3. Compuestos Hidrocarburos Alifáticos.

Los hidrocarburos alifáticos son los compuestos orgánicos no derivados del benceno. Están formados por átomos de carbono e hidrógeno, formando cadenas, las cuales pueden ser abiertas o cerradas. Los hidrocarburos pueden encontrarse unidos por enlaces simples, dobles o triples. Como el carbono es trivalente, está compartiendo dos electrones en cada enlace, y el hidrógeno, que

solamente tiene un electrón, sólo necesita un enlace para poder juntarse con el carbono. Los hidrocarburos alifáticos son ampliamente utilizados como disolventes, pues pueden disolver sustancias aceitosas, grasas, resinas o incluso caucho y otras sustancias, hecho muy útil en la industria de obtención de sustancias como pinturas, pegamentos, y un largo etc., así como también son de gran utilidad en la síntesis en química orgánica, donde son a menudo utilizados como materia prima.

Dentro del grupo de hidrocarburos alifáticos de cadena abierta tenemos a los alcanos, alquenos y alquinos, diferentes en base a la naturaleza de sus enlaces, y dentro del grupo de hidrocarburos de cadena cerrada, tendremos a aquellos compuestos que se cierran su cadena formando un anillo sin ser derivados del benceno, como por ejemplo, los cicloalcanos. Los hidrocarburos alifáticos pueden ser “no saturados”, en los casos de las cadenas unidas con dobles o triples enlaces, o saturados, cuando todos los enlaces que conforman la molécula son de tipo simple. Los hidrocarburos alifáticos se subdividen en: alcanos, alquenos y alquinos.

2.3.1. Saturados: Alcanos y cicloalcanos.

Alcanos: Son hidrocarburos alifáticos, también conocidos como de cadena abierta, constituidos por carbonos e hidrógenos unidos por enlaces sencillos.

Responden a la fórmula C_nH_{2n+2} , de donde n es el número de carbonos. Para nominar a este tipo de hidrocarburos, se debe ver el número de carbonos que posea la cadena, de manera que podamos anteponer el prefijo griego (met, et, prop, but, etc), añadiendo la terminación –ano.

Los primeros de la serie son:

- Metano: CH_4
- Etano: CH_3-CH_3
- Propano: $CH_3-CH_2-CH_3$
- Butano: $CH_3-CH_2-CH_2-CH_3$

Los hidrocarburos alifáticos saturados, siguen la fórmula de tipo C_nH_{2n+2} , de donde n hace referencia al número de átomos de carbono. Estos compuestos que poseen el mismo grupo funcional (el enlace), pero tienen diferente número de átomos, forman lo que se conoce como serie homóloga.

Alcanos lineales

Los alcanos, tanto lineales como ramificados, son compuestos de carbono e hidrógeno formados por enlaces simples carbono-carbono y carbono-hidrógeno.

La fórmula general de los alcanos es C_nH_{2n+2} , donde n representa el número de átomos de carbono.

Los alcanos lineales se nombran mediante prefijos que indican el número de carbonos de la cadena (met, et, prop, but, pent, hex, hept, oct, non, dec, undec), seguido del sufijo -ano.

En ocasiones se antepone el prefijo n - para indicar que se trata de la configuración lineal.

Tabla 3.3 ALCANOS

Nombre	Fórmula	P.f., °C	P.e., °C	Densidad relativa (a 20 °C)
Metano	CH ₄	-183	-162	
Etano	CH ₃ CH ₃	-172	- 88.5	
Propano	CH ₃ CH ₂ CH ₃	-187	- 42	
n-Butano	CH ₃ (CH ₂) ₂ CH ₃	-138	0	
n-Pentano	CH ₃ (CH ₂) ₃ CH ₃	-130	36	0.626
n-Hexano	CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₃	- 95	69	.659
n-Heptano	CH ₃ (CH ₂) ₅ CH ₃	- 90.5	98	.684
n-Octano	CH ₃ (CH ₂) ₆ CH ₃	- 57	126	.703
n-Nonano	CH ₃ (CH ₂) ₇ CH ₃	- 54	151	.718
n-Decano	CH ₃ (CH ₂) ₈ CH ₃	- 30	174	.730
n-Undecano	CH ₃ (CH ₂) ₉ CH ₃	- 26	196	.740
n-Dodecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CH ₃	- 10	216	.749
n-Tridecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₁ CH ₃	- 6	234	.757
n-Tetradecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₂ CH ₃	5.5	252	.764
n-Pentadecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₃ CH ₃	10	266	.769
n-Hexadecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₄ CH ₃	18	280	.775
n-Heptadecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₅ CH ₃	22	292	
n-Octadecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₆ CH ₃	28	308	
n-Nonadecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₇ CH ₃	32	320	
n-Eicosano	CH ₃ (CH ₂) ₁₈ CH ₃	36		
Isobutano	(CH ₃) ₂ CHCH ₃	-159	- 12	
Isopentano	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ CH ₃	-160	28	.620
Neopentano	(CH ₃) ₄ C	- 17	9.5	
Isohexano	(CH ₃) ₂ CH(CH ₂) ₂ CH ₃	-154	60	.654
3-Metilpentano	CH ₃ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	-118	63	.676
2,2-Dimetilbutano	(CH ₃) ₃ CCH ₂ CH ₃	- 98	50	.649
2,3-Diemtilbutano	(CH ₃) ₂ CHCH(CH ₃) ₂	-129	58	.668

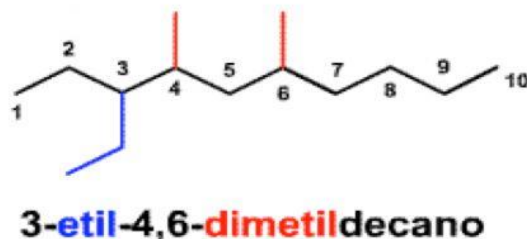
Alcanos ramificados

Igual que los alcanos lineales, son compuestos de carbono e hidrógeno formados por enlaces simples carbono-carbono y carbono-hidrógeno. La fórmula molecular de los alcanos es C_nH_{2n+2} , donde n representa el número de átomos de carbono.

Para nombrarlos:

- Se selecciona la cadena más larga
- Se numeran los carbonos de esta cadena de forma que el primer sustituyente tenga el menor índice posible. Si los sustituyentes están colocados a igual distancia de los átomos de carbono terminales, prevalece el más sencillo.

- Al nombrar los grupos que forman las ramificaciones hay que decir cuántos y dónde se han insertado, nombrando los sustituyentes terminados en il y por orden alfabético.



Los Cicloalcanos:

Los Cicloalcanos (también llamados Alicíclicos o Alcanos Cíclicos) son compuestos orgánicos pertenecientes al grupo de los Hidrocarburos, es decir, que están formados únicamente por átomos de carbono e hidrógeno.

Lo que diferencia a los Cicloalcanos del resto de Hidrocarburos es que sus átomos están unidos por enlaces simples en forma de anillo.

La Fórmula General de los Cicloalcanos es C_nH_{2n} :

- Ciclobutano (C_4H_8)
- Ciclo pentano (C_5H_{10})
- Ciclo hexano (C_6H_{12})...

Los Cicloalcanos se suelen representar mediante polígonos sencillos. En cada vértice se entiende que existe un átomo de carbono con dos hidrógenos:

- Ciclohexano
- Ciclohexano
- Ciclopropano
- Ciclopentano

Nomenclatura de los Cicloalcanos:

Se nombran como los alcanos de igual número de carbonos pero añadiendo el prefijo "Ciclo":

Ciclopropano, ciclobutano, ciclopentano, ciclohexano, cicloheptano...

Si poseen un radical se toma el nombre del ciclo como la cadena principal:

- Etilciclopentano
- Metilciclobutano
- Propilciclohexeno

Si poseen varios radicales ramificados se toma el nombre del ciclo como la cadena principal:

- Se toma el nombre de la cadena que las forma
- Sus posiciones se señalan con números
- Se numeran en el sentido de las agujas del reloj o al revés de manera que resulte la combinación de números más bajos:
 - I-Etil-2Metilciclobutano
 - I-Etil-3-Metilciclopentano
 - I-Propil-3-Metilciclohexano
 - I,3-Dimetilciclohexano

2.3.2. Insaturados alquenos y alquinos.

Cuando los hidrocarburos pierden un átomo de hidrógeno, se forman un radical, el cual se nombra de la misma manera, pero cambiando la terminación –ano, por –ilo (si nombramos el nombre independientemente) o –il (si se encuentra formando parte de un compuesto), por ejemplo:

CH₃ → metilo

CH₃-CH₂ → etilo

CH₃-CH₂-CH₂ → propilo.

Alquenos: Son hidrocarburos alifáticos que no se encuentran saturados, en cuya molécula se encuentra presente un doble enlace. Responden a la fórmula C_nH_{2n}, donde n es el número de carbonos. Se nombran como los alcanos pero cambiando la terminación –ano, por –eno.

Alquinos: Son hidrocarburos alifáticos no saturados, que siguen la fórmula C_nH_{2n-2}, en cuya estructura se encuentra presente un triple enlace. Se nombran igual que los alcanos o alquenos, pero cambiando la terminación por –ino.

Los hidrocarburos alifáticos cíclicos son los compuestos orgánicos que se encuentran formando un ciclo, representado con formas geométricas que dependen del número de carbonos que constituyan a

la molécula. Estos se nombran anteponiendo el prefijo –ciclo, a nombre del hidrocarburo, como por ejemplo, ciclobutano, ciclopropano. Los alcanos cíclicos presentan cadenas cerradas y responden a la fórmula general C_nH_{2n} esto indica que su fórmula corresponde a una insaturación.

Modo de nombrarlos

Los alcanos cíclicos se nombran igual que los alcanos del mismo número de átomos de carbono, pero anteponiendo el prefijo "ciclo-".

Regla 1: Si el ciclo tiene varios sustituyentes se numeran de forma que reciban los localizadores más bajos, y se ordenan por orden alfabético. En caso de que haya varias opciones decidirá el orden de preferencia alfabético de los radicales.

Regla 2: Si el compuesto cíclico tiene cadenas laterales más o menos extensas, conviene nombrarlo como derivado de una cadena lateral. En estos casos, los hidrocarburos cíclicos se nombran como radicales con las terminaciones "-il", "-enil", o "-inil".

2.3.3. Aromáticos.

Los hidrocarburos aromáticos, son hidrocarburos cíclicos, llamados así debido al fuerte aroma que caracteriza a la mayoría de ellos, se consideran compuestos derivados del benceno, pues la estructura cíclica del benceno se encuentra presente en todos los compuestos aromáticos.

La estructura del benceno se caracteriza por:

Es una estructura cerrada con forma hexagonal regular, pero sin alternancia entre los enlaces simples y los dobles (carbono-carbono). Sus seis átomos de carbono son equivalentes entre sí, pues son derivados mono sustituidos, lo que les hace ser idénticos.

La longitud de enlace entre los carbonos vecinos entre sí es iguales en todos los casos. La distancia es de 139 pm, no coincidiendo con la longitud media de un doble enlace, que es de 133 pm, ni siquiera a la de un enlace simple, que es de 154 pm. Los átomos de carbono del benceno, poseen una hibridación sp^2 , en tres de los orbitales atómicos, y estos son usados para poder unirse a los dos átomos de carbono que se encuentren a su lado, y también a un átomo de hidrógeno.

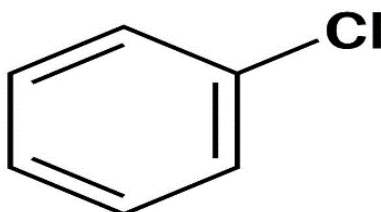
El orbital p (puro) de cada carbono restante, se encuentra orientado perpendicularmente al plano del anillo de hexágono, éste se solapa con los demás orbitales tipo p de los carbonos contiguos. Así, los seis electrones des localizados formarán lo que se conoce como, nube electrónica (π), que se colocará por encima, y también por debajo del plano del anillo. La presencia de la nube electrónica de tipo π , hace que sean algo más pequeños los enlaces simples entre los carbonos (C-C), otorgando una peculiar estabilidad a los anillos aromáticos.

A través de reacciones de sustitución, los átomos de hidrógeno del benceno se pueden ver remplazados por diferentes sustituyentes de gran variedad, pudiendo ser éstos, halógenos, grupos alquilo, nitro, $-\text{NO}_2$, y un largo etc. De este modo podemos encontrarnos derivados mono sustituidos, di sustituidos y trisustituidos.

2.3.4. Monocíclicos: benceno.

En este caso, el sustituyente podrá unirse a cualquiera de los seis átomos de C del anillo, pues todos ellos son equivalentes. Si el nombre del sustituyente no tiene prioridad sobre el hidrocarburo, éste se nombrará delante de la palabra benceno, por ejemplo:

Clorobenceno



Derivados -di- sustituidos:

Para nominar los derivados con más de un sustituyente es necesario numerar a los átomos de carbono que constituyen al benceno, de manera que se puedan asignar a los sustituyentes los números de menor valor posible.

Los sustituyentes en los derivados di sustituidos pueden ir colocados de tres maneras o posiciones diferentes, y vendrán nombrados siguiendo el orden alfabético:

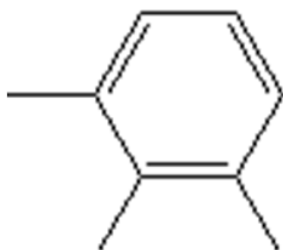
- Carbonos 1 y 2: si el sustituyente se encuentra en esta posición se dirá que se encuentra en posición “orto” (orto- “o-“). Ejemplo: $C_6H_4Br_2 = o\text{-dibromobenceno}$
- Carbonos 1 y 3: a esta posición de los sustituyentes se conocerá con el prefijo meta- (m-). Ejemplo: $C_6H_4ClNO_2 = m\text{-cloronitrobenceno}$
- Carbonos 1 y 4: en este caso se nombrará como “para-” (p-). Ejemplo: $C_6H_4(CH_2CH_3)_2 = p\text{-dietilbenceno}$

2.3.5. Policíclicos:

Derivados trisustituídos:

Los sustituyentes pueden encontrarse ocupando un total de tres posiciones distintas, uniéndose a los átomos de carbono número 1, 2 y 3, 1,2 y 4, o incluso a los átomos 1,3 y 5.

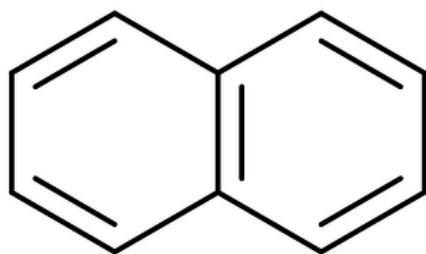
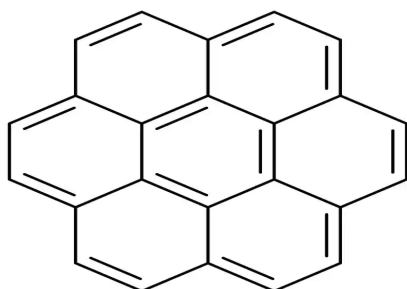
Ejemplo: $C_6H_3(CH_3)_3 = 1, 2,3\text{-trimetilbenceno}$



Los anillos del benceno, se pueden encontrar asociados entre sí en diferente número. Esta característica y su posibilidad de formar cadenas laterales en los anillos, justifican la gran cantidad de compuestos aromáticos que se conocen.

Ejemplo de otros compuestos aromáticos: Naftaleno, Coroneno, pireno, Hexaheliceno, Pentaceno, etc.

Naftaleno

**Coroneno**

Los hidrocarburos aromáticos son de gran importancia, pues entre ellos se encuentran sustancias tan importantes para nosotros como lo son las hormonas y las vitaminas (todas menos la vitamina C), también dentro de este grupo se encuentran otras sustancias de gran uso en nuestra vida cotidiana como puede ser el caso de los condimentos, perfumes, etc. En cambio, los hidrocarburos aromáticos también son bastante perjudiciales para la salud, por ejemplo, el benceno, tolueno, etilbenceno y Xileno, que son una serie de sustancias conocidas con las siglas BTEX, famosas por ser cancerígenas.

2.4. Compuestos Orgánicos Polifuncionales:

Los compuestos oxigenados son aquellos que contienen un enlace carbono-oxígeno. Este puede ser sencillo o doble.

Entre los compuestos oxigenados más habituales podemos distinguir:

- Enlace sencillo C-O.
- Alcoholes.
- Fenoles.
- Éteres.
- Enlace doble C=O

- Aldehidos.
- Cetonas.
- Ácidos carboxílicos.
- Cloruros de ácido.
- Anhídridos.
- Esteres.
- Amidas.

2.4.1. Éteres y ésteres.

Éter:

Los éteres son los compuestos formados por dos radicales unidos entre sí mediante un átomo de oxígeno, por lo tanto, su grupo funcional es: R-O-R.

Propiedades físicas:

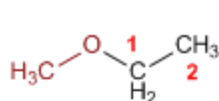
La mayoría de los éteres son líquidos a temperatura ambiente. Sus puntos de ebullición aumentan al aumentar el peso molecular. Son solubles en agua los éteres que tienen de uno a cinco átomos de carbono y a medida que la longitud de la cadena aumenta su solubilidad. También debemos destacar que son menos densos que el agua.

Propiedades químicas:

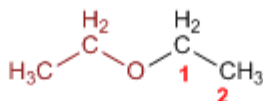
Los éteres tienen muy poca reactividad química, debido a la dificultad que presenta la ruptura del enlace C-O. Por ello, se utiliza mucho como disolventes inertes en reacciones orgánicas.

Nomenclatura de Éteres:

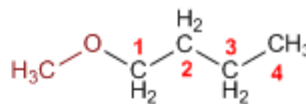
Los éteres pueden ser nombrados como alcoxi derivados de alcanos. Se toma como cadena principal la de mayor longitud y se nombra el alcóxido como un sustituyente.



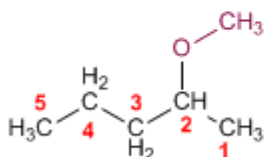
Metoxietano



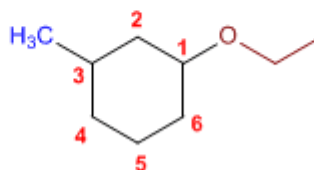
Etoxietano



1-Metoxibutano

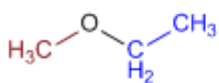


2-Metoxipentano

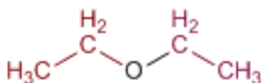


1-Etoxi-3-metilciclohexano

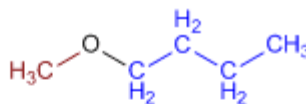
La nomenclatura funcional (IUPAC) nombra los éteres como derivados de dos grupos alquilo, ordenados alfabéticamente, terminando con el nombre en la palabra éter.



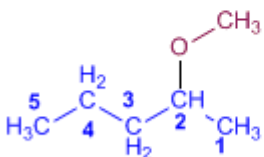
Etil metil éter



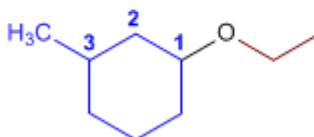
Dietil éter



Butil metil éter



Metil pent-2-il éter



Etil 3-metilciclohexil éter

Ésteres:

Son sustancias orgánicas que se encuentran en productos naturales (animal y vegetal).

Propiedades físicas:

Los ésteres al igual que las amidas son solubles en disolventes orgánicos como alcoholes, éteres, alcanos e hidrocarburos aromáticos. Los ésteres y amidas terciarias, se utilizan frecuentemente como disolventes en las reacciones orgánicas.

Nomenclatura:

Los ésteres proceden de condensar ácidos con alcoholes y se nombran como sales del ácido que provienen. La nomenclatura IUPAC cambia la terminación -oico del ácido por -oato, terminando con el nombre del grupo alquilo unido al oxígeno.

2.4.2. Alcoholes.

Los alcoholes son compuestos orgánicos formados a partir de los hidrocarburos mediante la situación de uno o más grupos hidroxilo por un número igual de átomos de hidrógeno.

El alcohol más simple, metanol (alcohol metílico), tiene la fórmula CH_4O y la estructura $\text{CH}_3\text{--O--H}$. El grupo funcional del alcohol es el grupo OH (grupo hidroxilo). Los alcoholes se nombran tomando el nombre del alcano, agregándole la terminación "ol".

Los alcoholes se utilizan como productos químicos intermedios y disolventes en las industrias textiles, colorantes, productos químicos, detergentes, perfumes, alimentos, bebidas, cosméticos, pinturas y barnices.

Propiedades físicas:

Presentan punto de ebullición altos, ya que por la polaridad del compuesto y la cantidad de puentes. En los alcoholes el punto de ebullición, punto de fusión y la densidad aumentan con la cantidad de átomos de carbono y disminuye con el aumento de las ramificaciones.

Respecto a la solubilidad los alcoholes, metanol, etanol y propanol, son muy solubles en H_2O , mientras que a partir del butanol su solubilidad disminuye; es decir, a medida que va aumentando la cadena carbonada, va disminuyendo su polaridad y por consiguiente su solubilidad. La alta solubilidad de los primeros tres alcoholes se debe a la gran facilidad para formar enlaces puentes de hidrógeno entre las moléculas del H_2O y del alcohol. La densidad de los alcoholes aumenta con el número de carbonos y sus ramificaciones.

Propiedades químicas:

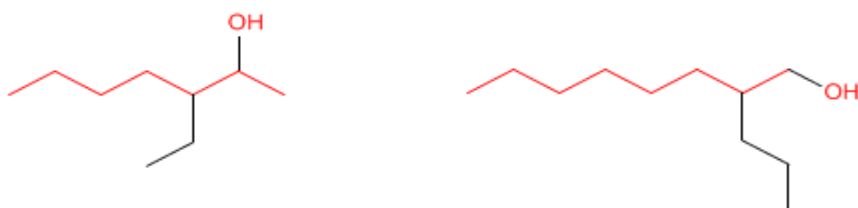
Los alcoholes pueden comportarse como ácidos o bases, esto gracias al efecto inductivo, que no es más que el efecto que ejerce la molécula de -OH como sustituyente sobre los carbonos adyacentes.

Obtención de Alcoholes:

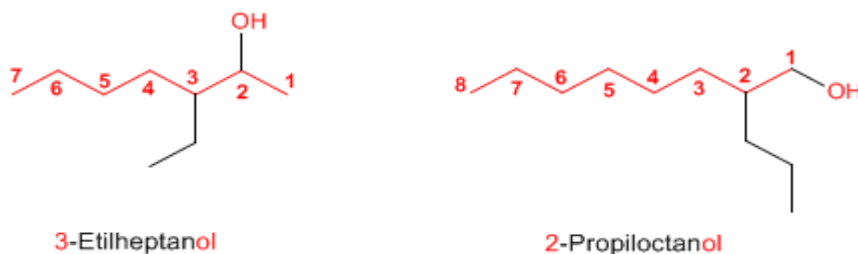
Los alcoholes pueden ser obtenidos a partir de hidratación o hidrobtoración de alquenos, o mediante hidrólisis de halogenuros de alquilo. Para la obtención de alcoholes por hidratación de alquenos se utiliza el ácido sulfúrico y el calor.

Nomenclatura de los alcoholes.

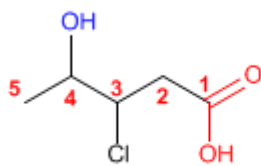
1.- Se elige como cadena principal la de mayor longitud que contenga el grupo -OH.



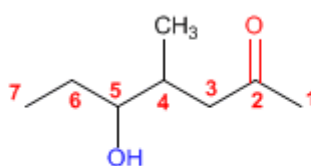
2.- Se numera la cadena principal para que el grupo -OH tome el localizador más bajo. El grupo hidroxilo tiene preferencia sobre cadenas carbonadas, halógenos, dobles y triples enlaces. El nombre del alcohol se construye cambiando la terminación -o del alcano con igual número de carbono por -ol.



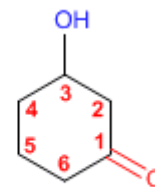
4.- Cuando en la molécula hay grupos funcionales de mayor prioridad, el alcohol pasa a ser un mero sustituyente y se llama hidroxio-. Son prioritarios frente a los alcoholes: ácidos carboxílicos, anhídridos, ésteres, etc...



Ácido 3-cloro-4-hidroxi-5-pentanoico

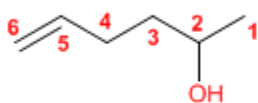


5-Hidroxi-4-metilheptanona

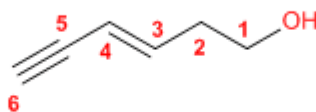


3-Hidroxiciclohexanona

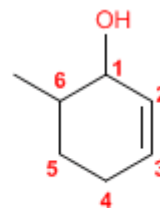
5.- El grupo -OH es prioritario frente a los alquenos y alquinos. La numeración otorga el localizador más bajo al -OH y el nombre de la molécula termina en -ol.



Hex-5-en-2-ol



Hex-3-en-5-in-1-ol



6-Metilciclohex-2-en-1-ol

Los alcoholes se clasifican en primarios, secundarios y terciarios, dependiendo del carbono funcional al que se une al grupo hidroxilo. Los alcoholes primarios forman aldehídos o ácidos carboxílicos, son muy Los alcoholes terciarios son sólidos. Son resistentes a la oxidación en medios neutros y alcalinos.

Tipo de Alcohol	Estructura	Ejemplo
Alcohol primario	$\begin{array}{c} \text{R} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{H} \end{array}$
Alcohol Secundario	$\begin{array}{c} \text{R} \\ \\ \text{R}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{H} \end{array}$
Alcohol Terciario	$\begin{array}{c} \text{R} \\ \\ \text{R}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{R} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$

2.4.3. Fenoles.

Recibe el nombre de fenol, el alcohol monohidroxílico derivado del benceno; dándosele, además, a todos los compuestos que tengan un radical oxidrónico unido al anillo bencénico. El fenol fue obtenido por Ruge en 1834; separó del asfalto lo que él llamó ácido carbónico. Nombre con el que se conoció hasta principios de este siglo. En 1914 Meyers y Bergius, proponen hidrolizar el monoclorobenceno con hidróxido de sodio. Proceso que se generalizó pocos años después. Hasta la Primera Guerra Mundial, solo se había logrado obtener el fenol o ácido carbónico por la separación del asfalto; hasta que se estableció el proceso basado en la sulfonación del benceno hidrolizado con hidróxido de sodio, y volviendo a hidrolizar el producto, que era el bencensulfonato de sodio; a este se le llamó fenol sintético.

En 1930, se transforma el proceso de hidrólisis del monoclorobenceno, obteniéndose el fenol, en fase vapor, hidrolizando al monoclorobenceno con agua, en lo que se conoce como proceso de Rashig-Hooker. En 1950, la B.P. Internacional. Ltd. y la Hercules Chemical, Inc., instituyen un nuevo proceso para la obtención del fenol, oxidando el cumeno hasta hidroperóxido de cumeno y catalizando la reacción de éste para obtener fenol y un segundo producto comercial, la acetona. Este proceso surgió debido a la sobreproducción del cumeno que era subproducto en la reacción de obtención del hule sintético G R - S, además de la necesidad de la obtención de acetona que se usaba como aditivo en gasolinas de aviación. En 1961, se busca reformar los procesos de obtención del fenol, y debido a esto, la Dow Chemical of Canadá, Ltd., lo obtiene por medio de la oxidación del tolueno hasta ácido benzoico, y la re oxidación de éste para obtener fenol.

Propiedades

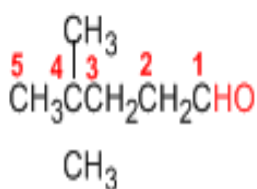
Su Fórmula química es C_6H_5OH , y tiene un Punto de fusión de $43\text{ }^{\circ}C$ y un Punto de ebullición de $182\text{ }^{\circ}C$. El fenol no es un alcohol, debido a que el grupo funcional de los alcoholes es R-OH, y en el caso del fenol es pH-OH. El fenol es conocido también como ácido fénico o ácido carbónico, cuya Ka es de $1,3 \cdot 10^{-10}$. Se puede detectar el sabor y el olor del fenol a niveles más bajos que los asociados con efectos nocivos. El fenol se evapora más lentamente que el agua y una pequeña cantidad puede formar una solución con agua. El fenol se inflama fácilmente, es corrosivo y sus gases son explosivos en contacto con la llama. El producto comercial es un líquido. Tiene un olor repugnantemente dulce y alquitranado.

2.4.4. Aldehídos.

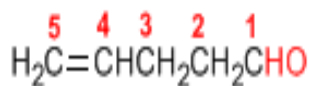
Los aldehídos presentan el grupo carbonilo en posición terminal. El carbonilo está unido a un hidrógeno y a un grupo alquilo. Los aldehídos y las cetonas presentan las mismas propiedades químicas y físicas.

Nomenclatura de Aldehído:

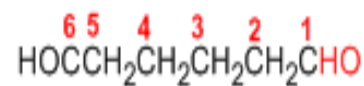
Los aldehídos se nombran reemplazando la terminación -ano del alcano correspondiente por -al. Cuando la cadena contiene dos funciones aldehído se emplea el sufijo -dial.



4,4-Dimetilpentanal



Hex-4-enal



Pentanodial

2.4.5. Cetonas.

Una cetona es un compuesto orgánico caracterizado por poseer un grupo funcional carbonilo.

El grupo funcional carbonilo consiste en un átomo de carbono unido con un doble enlace covalente a un átomo de oxígeno, y además unido a otros dos átomos de carbono.

Propiedades físicas:

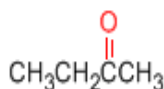
La presencia del grupo carbonilo convierte a las cetonas en compuestos polares. Los puntos de ebullición son mayores que el de los alcanos del mismo peso molecular, pero menores que el de los alcoholes y ácidos carboxílicos comparables.

Propiedades químicas:

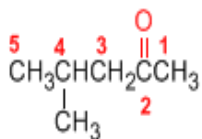
Se comportan como ácidos debido a la presencia del grupo carbonilo.

Nomenclatura de Cetonas:

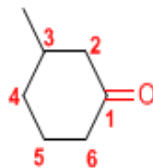
Las cetonas se nombran sustituyendo la terminación -ano del alcano con igual longitud de cadena por -ona. Se toma como cadena principal la de mayor longitud que contiene el grupo carbonilo y se numera para que éste tome el localizador más bajo.



Butanona



4-Metil-2-pentanona



3-Metilciclohexanona

2.4.6. Ácidos carboxílicos.

Los compuestos orgánicos que contienen en su molécula el grupo funcional COOH (un grupo $>\text{C}=\text{O}$, unidos al mismo átomo del carbono son llamados ácidos carboxílicos). Estos compuestos se forman cuando el hidrógeno de un grupo aldehído es reemplazado por un grupo -OH.

Los ácidos carboxílicos son compuestos que están ampliamente distribuidos en la naturaleza, ya que los podemos encontrar en todos lados, como el ácido láctico de la leche agria y la degradación bacteriana de la sacarosa en la placa dental, etc.

Propiedades físicas:

Los ácidos carboxílicos presentan puntos de ebullición elevados debido a la presencia de doble puente de hidrógeno. Mientras que el punto de fusión varía según el número de carbono. Solubilidad: El grupo carboxilo $-\text{COOH}$ confiere carácter polar a los ácidos y permite la formación de puentes de hidrógeno entre la molécula de ácido carboxílico y la molécula de agua.

Propiedades químicas:

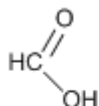
El comportamiento químico de los ácidos carboxílicos está determinado por el grupo carboxilo -COOH. Esta función consta de un grupo carbonilo ($\text{C}=\text{O}$) y de un hidroxilo (-OH). Donde el -OH es el que sufre casi todas las reacciones: pérdida de protón (H^+) o reemplazo del grupo -OH por otro grupo.

Los ácidos carboxílicos pueden obtenerse a partir de reacciones química como la oxidación de alcoholes primarios.

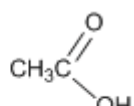
Oxidación de alcoholes primarios: para obtener ácidos carboxílicos mediante esta reacción, el alcohol primario se trata como un agente oxidante fuerte donde el alcohol actúa como un agente reductor oxidándose hasta ácido carboxílico.

Nomenclatura:

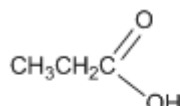
La IUPAC nombra los ácidos carboxílicos reemplazando la terminación -ano del alcano con igual número de carbono por -oico.



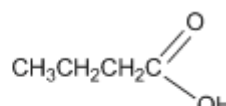
Ác. metanoico
(Ác. fórmico)



Ác. etanoico
(Ác. acético)



Ác. propanoico
(Ác. propiónico)



Ác. butanoico
(Ác. butírico)

2.4.7. Heterocíclicos.

Los Compuestos heterocíclicos son compuestos orgánicos cíclicos en los que al menos uno de los componentes del ciclo es de un elemento diferente al carbono. Los átomos distintos de carbono presentes en el ciclo se denominan heteroátomos, siendo más comunes los heteroátomos de nitrógeno, oxígeno y azufre.

Los heterociclos pueden ser saturados o insaturados. Los heterocíclicos insaturados pueden ser aromáticos o no aromáticos.

Nomenclatura Sistemática

1. Ver si el sistema tiene un nombre trivial, sino se encuentra, entonces se construye su nombre utilizando el Sistema de Hantzsch y Widman para sistemas mononucleares o se construye el nombre para sistemas fusionados siguiendo las indicaciones que se presentan a continuación.
2. Los nombres de heterociclos con nombres triviales y semitriviales retenidos o reconocidos por la IUPAC son importantes porque éstos se utilizan como base para construir otros nombres de compuestos policíclicos.

Nombres triviales de sistemas anulares comunes.

- Nombres “triviales” o “comunes” que se basaban en el origen, propiedad física o biológica; o preferencia del descubridor.
- “No contienen información estructural útil”
- Reconocidos por la IUPAC.

2.4.8. Hidrocarburos que contienen nitrógeno.

Los compuestos nitrogenados son aquellos que contienen un enlace carbono-nitrógeno. Este puede ser sencillo o múltiple. En este grupo no incluimos a las amidas que ya han sido consideradas dentro de los compuestos oxigenados por poseer un doble enlace C=O.

Entre los compuestos nitrogenados más habituales podemos distinguir:

- Enlace sencillo C-N.
- Aminas.
- Nitrocompuestos.
- Enlace triple CN
- Nitrilos.

2.4.9. Aminas: Alifáticas, aromáticas.

Aminas:

Las aminas son compuestos derivados del amoníaco (NH_3). Se forma cuando se sustituye uno, dos o tres átomos de hidrógeno del amoníaco por radicales.

Propiedades físicas:

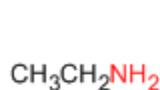
Las aminas son compuestos polares, por lo que las de masa molecular baja, son solubles en agua.

Las aminas se caracterizan por sus olores desagradables algunas de ellas tienen olor a pescado.

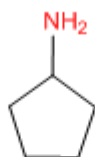
Las aminas primarias y secundarias tienen puntos de ebullición menores que los de los alcoholes, pero son mayores que los de los éteres.

Nomenclatura:

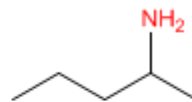
Las aminas se pueden nombrar como derivados de alquilaminas o alcanaminas.



Etilamina
(Etanamina)

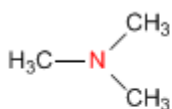


Ciclopentilamina
(Ciclopentanamina)

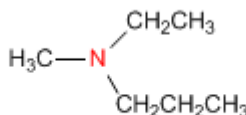


Pent-2-ilamina
(Pentan-2-amina)

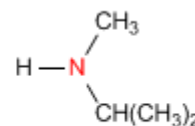
Si un radical está repetido varias veces, se indica con los prefijos di-, tri-,... Si la amina lleva radicales diferentes, se nombran alfabéticamente.



Trimetilamina



Etilmetilpropilamina



Isopropilmetilamina

2.4.10. Amidas.**Amidas:**

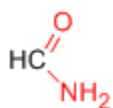
Son compuestos que están formados por los grupos funcionales de aminas y ácidos carboxílicos.

Propiedades físicas:

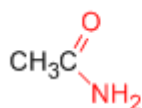
Las amidas tienen los puntos de ebullición más altos porque tienen fuertes interacciones dipolo-dipolo. Pueden formar enlaces de hidrógeno cuando el nitrógeno de una amida se une al hidrógeno de otra molécula.

Nomenclatura:

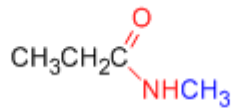
Las amidas se nombran como derivados de ácidos carboxílicos sustituyendo la terminación -oico del ácido por -amida.



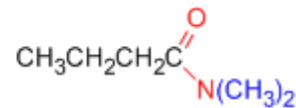
Metanamida



Etanamida

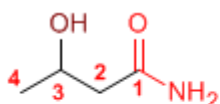


N-Metilpropanamida

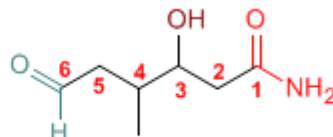


N,N-Dimetilbutanamida

Las amidas actúan como sustituyentes cuando en la molécula hay grupos prioritarios, en este caso, preceden el nombre de la cadena principal y se nombran como carbmoíl-



3-Hidroxibutanamida



3-Hidroxi-4-metil-6-oxohexanamida

2.4.11. Aminas Heterocíclicas.

Un heterociclo es un compuesto cíclico que contiene átomos de dos o más elementos en su anillo, por lo regular carbono junto con nitrógeno, oxígeno o azufre. Las aminas heterociclos son particularmente comunes, y tienen muchas propiedades biológicas importantes. Los más comunes son los heterociclos con anillos de 5 o 6 átomos y donde uno o más átomos de carbono están sustituidos por átomos de nitrógeno. Por ejemplo la piridina y la pirimidina son heterocíclicos de 6 miembros con nitrógenos en sus anillos.

2.4.12. Nitrilos.

Nitrilos o cianuros. Son sustancias en las que, en uno de los extremos de la cadena de carbono, hay un triple enlace entre un átomo de carbono y un átomo de nitrógeno. El radical R puede ser una cadena de carbono o un hidrógeno. Los nitrilos cuando actúan como grupo principal, utilizan la terminación –nitrilo al final del nombre de la cadena principal. Cuando el grupo R-CN no es el grupo principal, se utiliza la palabra ciano para designarlo. Los nitrilos o cianuros son en la mayoría muy tóxicos, por lo que deben de ser manejados con mucho cuidado en el laboratorio.

2.5. Hidrocarburos que contienen azufre.

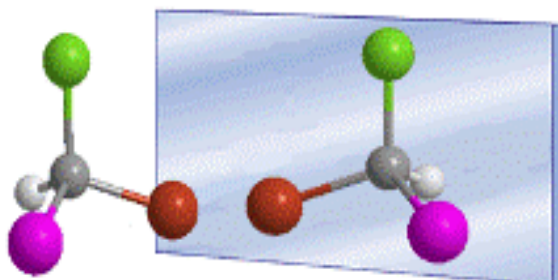
El azufre, elemento del grupo 16 (el mismo del oxígeno) tiene una química muy rica y variada, con gran impacto no solo en biología de seres vivos, sino también en nuestro cotidiano.

Aunque no son exactamente compuestos, es de citar que el azufre se encuentra normalmente en la forma de moléculas cíclicas conteniendo un número variable de átomos de azufre. Al contrario del oxígeno, el elemento que le está exactamente por encima en la tabla periódica, que forma esencialmente moléculas diatómicas (O_2) o cuando mucho triatómicas (el ozono – O_3), el azufre en su forma más común, está constituido por moléculas cíclicas con ocho átomos de carbono (S_8) existiendo formas alotrópicas muy variadas como el S_{12} , S_{18} o S_{20} , pudiendo inclusive encontrarse en la forma de azufre fibroso con largas moléculas helicoidales S_{∞}

UNIDAD III ISOMERIA

3.1. Conformación de las moléculas y estereoquímica.

La estereoquímica es el estudio de los compuestos orgánicos en el espacio. Para comprender las propiedades de los compuestos orgánicos es necesario considerar las tres dimensiones espaciales. Las bases de la estereoquímica fueron puestas por Jacobus van't Hoff y Le Bel, en el año 1874. De forma independiente propusieron que los cuatro sustituyentes de un carbono se dirigen hacia los vértices de un tetraedro, con el carbono en el centro del mismo.



La disposición tetraédrica de los sustituyentes de un carbono sp^3 da lugar a la existencia de dos posibles compuestos, que son imágenes especulares no superponibles, llamados enantiómeros. En general a las moléculas que se diferencian por la disposición espacial de sus átomos, se les denomina estereoisómeros.

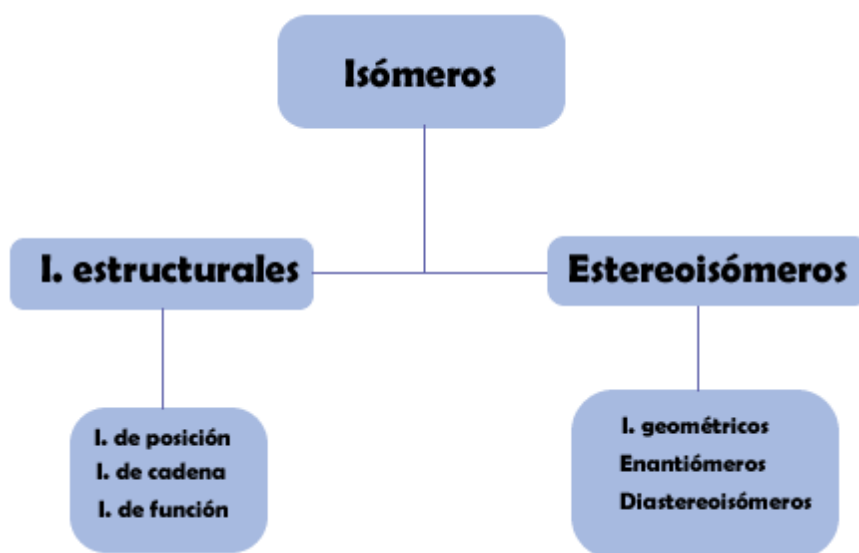
3.2. Isómeros constitucionales:

Los isómeros son moléculas que tienen la misma fórmula molecular pero diferente estructura. Se clasifican en isómeros estructurales y estereoisómeros. Los isómeros estructurales difieren en la forma de unión de sus átomos y se clasifican en isómeros de cadena, posición y función. Como ejemplo, dibujemos los isómeros estructurales de fórmula C_2H_6O .

Etanol C_2H_5OH

Dietiléter CH_3OCH_3

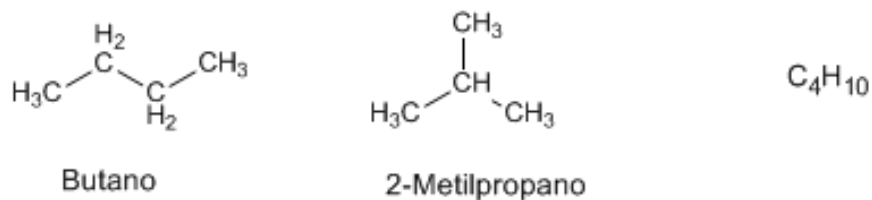
Solamente existen dos formas de unir los átomos que generan compuestos diferentes. En el etanol, el oxígeno se enlaza a un carbono y a un hidrógeno. En el dimetil éter está unido a dos carbonos. Se trata de isómeros estructurales puesto que los átomos están unidos de forma distinta en ambas moléculas. Al pertenecer a diferentes grupos funcionales (alcohol y éter) se les clasifica como isómeros de función.



3.2.1. De cadena.

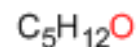
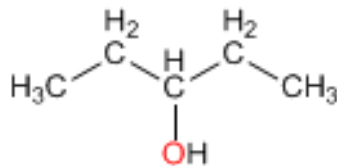
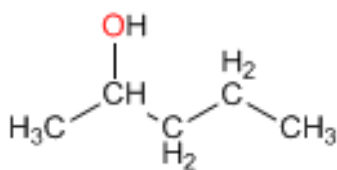
Isómeros de cadena

Se distinguen por la diferente estructura de las cadenas carbonadas. Un ejemplo de este tipo de isómeros son el butano y el 2-metilpropano.



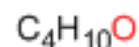
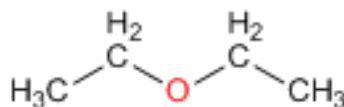
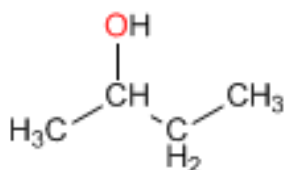
3.2.2. De posición.

El grupo funcional ocupa una posición diferente en cada isómero. El 2-pentanol y el 3-pentanol son isómeros de posición.



3.2.3. De función.

El grupo funcional es diferente. El 2-butanol y el dietil éter presentan la misma fórmula molecular, pero pertenecen a familias diferentes -alcohol y éter- por ello se clasifican como isómeros de función.



3.3. Isómeros espaciales (estereoisómeros)

Estereoisomería.

La estereoquímica es el estudio de la estructura tridimensional de las moléculas. Es imposible estudiar química orgánica sin conocer la estereoquímica.

Uno de los aspectos de la estereoquímica es la estereoisomería.

La estereoisomería es la isomería que presentan aquellos compuestos que teniendo la misma fórmula estructural difieren en la disposición espacial de sus átomos.

Clasificación de los Estereoisómeros

Los estereoisómeros pueden clasificarse del modo siguiente:



Las isómeras configuracionales no pueden interconvertirse a temperatura ambiente. Por ello, a diferencia de los isómeros conformacionales (lección 4), pueden separarse. Para pasar de uno a otro es preciso normalmente romper y formar enlaces ($E_a = 80-90$ kcal/mol).

Hay dos clases:

- 1. Isómeros Geométricos:** Los que se originan por la distinta orientación de átomos o grupos respecto de un doble enlace o un plano de anillo.
- 2. Isómeros Ópticos:** Los que se originan por la distinta orientación espacial en torno a un estereocentro (generalmente un C con hibridación sp^3 unido a 4 sustituyentes distintos). Se les denomina así por su distinto comportamiento frente a la luz polarizada.

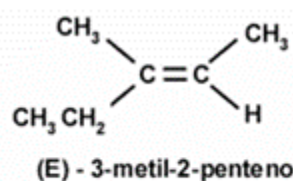
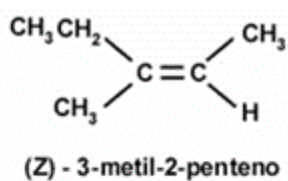
Los isómeros ópticos abarcan a dos tipos de isómeras configuracionales:

- Los enantiómeros: que se relacionan por ser imágenes especulares no superponibles.
- Los diastereoisómeros o diastereómeros: isómeras configuracionales que no son imágenes especulares uno del otro.

Isomería geométrica

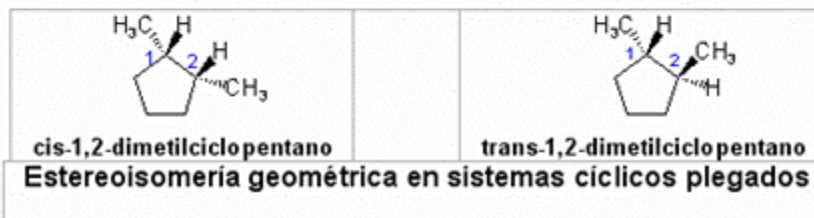
Es la que se debe a las diferentes disposiciones espaciales de los grupos unidos a un doble enlace o sustituidos sobre un compuesto cíclico, lo que impide la posibilidad de giro alrededor del enlace simple C-C.

Ejemplos:

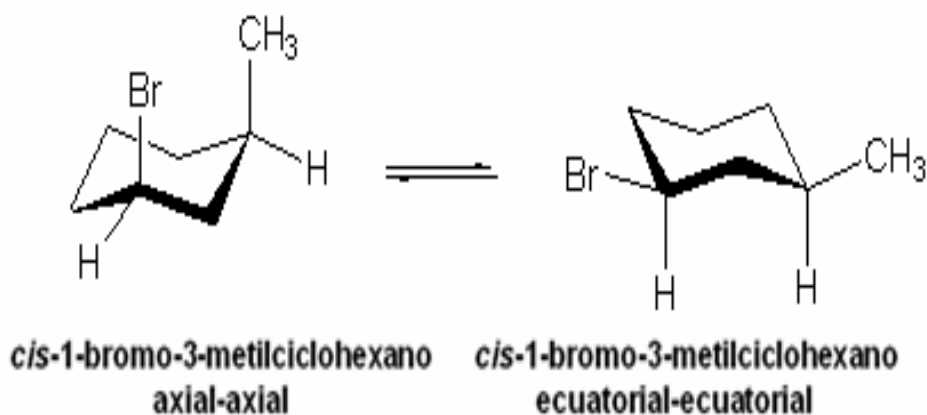


Esteroisomería geométrica en sistemas cíclicos planos.

En este caso el **plano de referencia** para determinar si una molécula es *cis* o *trans* es el **plano que contiene el esqueleto carbonado** de dicha molécula.



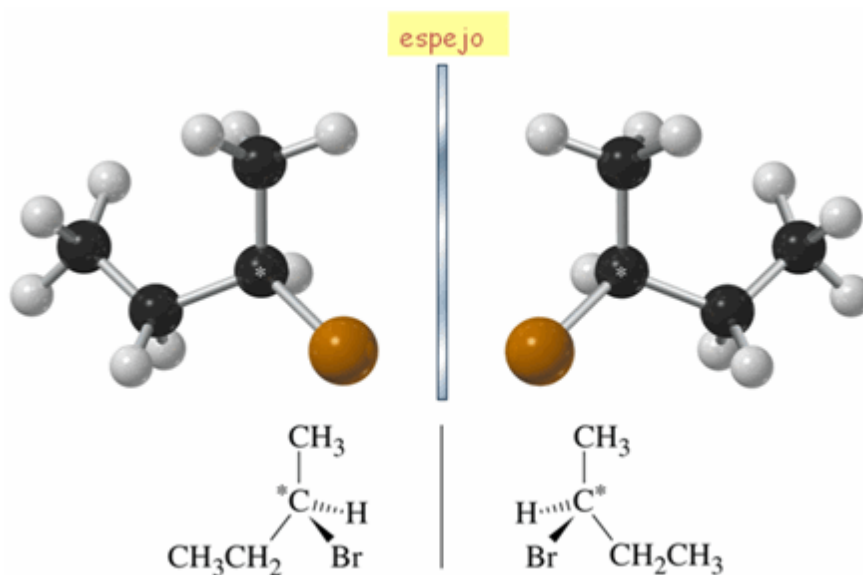
En el caso del ciclohexano por cada estereoisómero cis-trans habrá dos conformeros, uno ecuatorial y otro axial.



Isomería óptica

La presentan aquellos compuestos que se diferencian únicamente en su comportamiento frente a la luz polarizada. Se le denomina así precisamente por estar relacionada con una propiedad óptica.

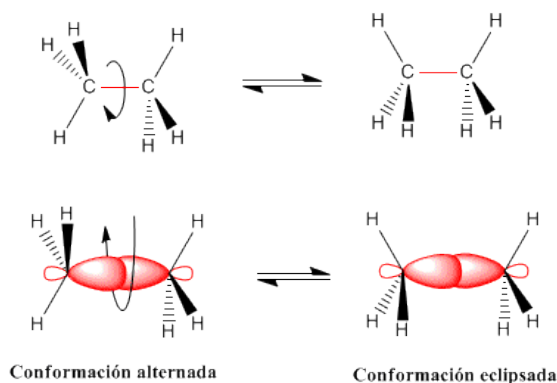
Ejemplo: 2-Bromobutano. Hay dos isómeros ópticos; son imágenes especulares y no son superponibles.



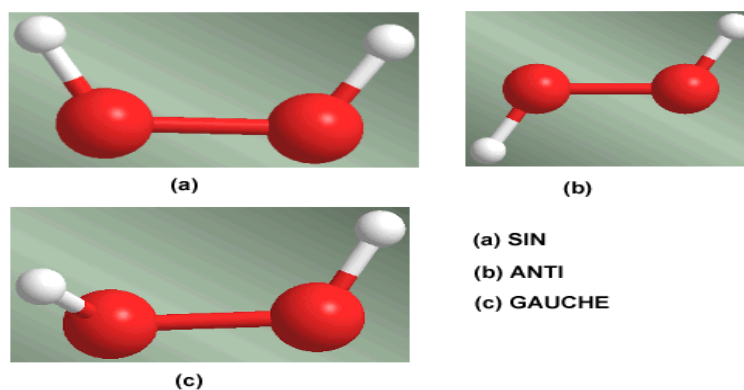
3.4. Isomería conformacional: de alcanos y cicloalcanos:

Los enlaces simples entre átomos tienen simetría cilíndrica y permiten la rotación de los grupos que unen. Las diferentes disposiciones espaciales que adoptan los átomos como consecuencia de la rotación en torno al enlace se llaman conformaciones. Una conformación concreta de las múltiples posibles se denomina **confórmero**.

La rotación del enlace carbono-carbono en el etano da lugar a dos conformaciones límite -la conformación alternada (con los hidrógenos alternados) y la conformación eclipsada (con los hidrógenos enfrentados-. El paso de la conformación alternada a la eclipsada o viceversa se realiza por giro de 60° . Obsérvese que en un giro de 360° existen infinitas conformaciones posibles.



La rotación en torno al enlace simple oxígeno-oxígeno en la molécula de agua oxigenada genera tres conformaciones de especial importancia. La conformación que tiene los hidrógenos enfrentados se llama SIN. Cuando los hidrógenos se sitúan a lados opuestos se habla de confórmero ANTI. La conformación que deja los hidrógenos a 60° recibe el nombre de GAUCHE.



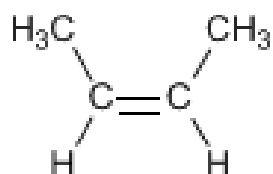
3.5. Isomería configuracional (cistrans): en dobles enlaces, en anillo, sistema E-Z.

Isomería cis/trans

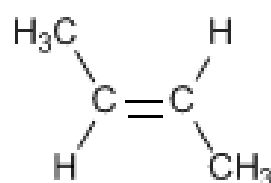
Son compuestos que difieren en la disposición espacial de sus grupos. Se llaman cis los isómeros geométricos que tienen los grupos al mismo lado y trans los que lo tienen a lados opuestos.

cis y trans-2-Buteno

El 2-buteno puede existir en forma de dos isómeros dependiendo de la orientación espacial de los grupos metilos. Se llama isómero cis el compuesto que tiene los metilos hacia el mismo lado. En el isómero trans los metilos se encuentran orientados a lados opuestos.



cis-2-Buteno

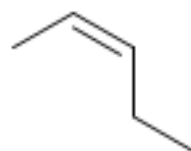


trans-2-Buteno

En general la notación cis/trans se emplea cuando existe al menos un grupo igual en ambos carbonos sp².



trans-2-Penteno



cis-2-Penteno

En el isomerismo geométrico E-Z, que es un tipo específico de estereoisomerismo, comparamos la organización espacial de los átomos de dos moléculas de la misma sustancia. Se usa cuando los términos geométricos cis-trans se vuelven insuficientes para definir el isomerismo geométrico de las estructuras.

Para realizar este análisis, las cadenas estudiadas deben tener las siguientes características:

- Cadenas abiertas con un doble enlace entre los carbonos;

- Cadenas cerradas;
- La cadena debe tener dos carbonos con al menos tres enlaces diferentes (en el enlace doble o en cualquier parte de la cadena cerrada).

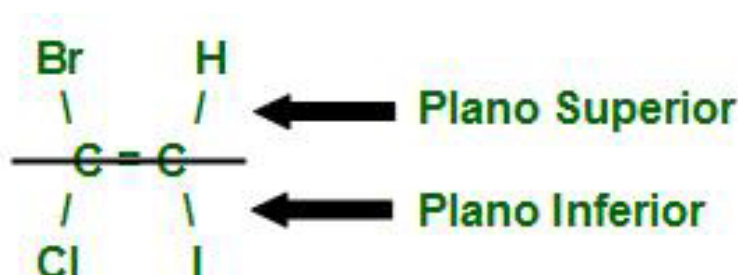
Nota: Cuando los ligandos de un carbono del par son iguales a los ligandos del otro carbono del par, el isomerismo es cis-trans.

El siguiente ejemplo general presenta un caso de isomería EZ, ya que todos los ligantes de carbono del par son diferentes entre sí.



En la estructura tenemos dos carbonos con diferentes ligantes.

Los criterios anteriores se utilizan para el estudio de la isomería geométrica EZ teniendo en cuenta el posicionamiento de los ligandos de carbono evaluados, ya que, como en la cadena cerrada o en presencia del doble enlace, no hay fenómeno de rotación, es posible dividir el ella en un plano superior e inferior. En el siguiente esquema, tenemos la representación del plano que separa los planos de los planos inferior y superior (siempre corta los dos carbonos con diferentes ligantes).



Plano que delimita ligandos de la región inferior y superior de la molécula

Como en el isómero EZ los cuatro ligandos evaluados son diferentes, tenemos en cuenta la diferencia en el número atómico de estos ligandos. Cuando tenemos el ligando de cada uno de los carbonos del

mayor número atómico en el mismo plano, es un isómero Z, ya que Z (ZusammenEntgegen) significa "juntos" en alemán. Si los ligandos de número más atómicos de ambos carbonos del par están en diferentes planos, tenemos un isómero E, ya que E (Entgegen) significa opuestos en alemán.

3.6. Isomería configuracional óptica: Enantiómeros y Diastereómeros

Los enantiómeros: que se relacionan por ser imágenes especulares no superponibles

Los diastereoisómeros o diastereómeros: isómeros configuracionales que no son imágenes especulares uno del otro.

UNIDAD IV REACCIONES DE OXIDACION

4.1. Reacciones de oxidación en química orgánica

En Química Orgánica existen igualmente reacciones redox, si bien es más complejo determinar el estado de oxidación del carbono, ya que, en una misma cadena, cada carbono puede tener un estado de oxidación distinto, y como consecuencia de ello, al calcular el estado de oxidación, en ocasiones salen números fraccionarios, que no son sino las medias aritméticas de los estados de oxidación de cada uno de los átomos de carbono. Habitualmente, se sigue utilizando el concepto de oxidación como aumento en la proporción de oxígeno y reducción como disminución es la proporción de oxígeno.

Las reacciones de oxidación-reducción más habituales son:

- Oxidación de alquenos
- Ozonolisis.
- Oxidación de alcoholes.
- Oxidación y reducción de aldehídos y cetonas.
- Combustión.

4.2. Oxidación de alcanos.

4.2.1. Reacciones de combustión.

Oxidación de alcanos: Combustión.

La combustión de los alcanos es una de las reacciones orgánicas más importantes si se tiene en cuenta la masa de material que utiliza este proceso. La combustión de gas natural, gasolina y fuel implica en su mayor parte la combustión de alcanos. Sin embargo, esta combustión deja de ser una reacción orgánica típica porque en primer lugar los reactivos de la reacción son en realidad mezclas de alcanos y en segundo lugar porque el producto deseado de la reacción es el calor que desprende y no los productos obtenidos en ella. De hecho, los productos generados en el proceso de combustión de los alcanos son, por lo general, compuestos sin interés y su eliminación, debido a su volumen, constituye un importante problema.

La ecuación para la combustión de un alcano, por ejemplo, el metano, es la siguiente: $\text{CH}_4 + 2 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$.

Sin embargo, en muchos procesos de combustión, como la quema de gasolina en un motor, no se logra una oxidación completa del carbono generándose en muchos casos monóxido de carbono ($\text{C}=\text{O}$). Otros productos, como los aldehídos, también son el resultado de una combustión incompleta de los alcanos.

Cuando se produce una explosión en un motor de combustión interna el pistón es impulsado hacia delante con un golpe más bien violento. Estas explosiones prematuras dan lugar al fenómeno conocido como picado.

La tendencia de una gasolina a causar el picado de un motor depende de la naturaleza de los hidrocarburos que la componen. En general, los hidrocarburos ramificados inhiben la tendencia al picado de la gasolina. La tendencia al picado se mide cuantitativamente mediante el número de octanos (octanaje). En esta escala arbitraria se asigna el valor cero al heptano y el valor 100 al 2,2,4-trimetilpentano (isooctano). n-heptano (0 octanos) 2,2,4-trimetilpentano (100 octanos)

Por ejemplo, una gasolina con un número de octanos de 86 significa que su tendencia a provocar el picado del motor es equivalente a una mezcla compuesta por un 86% de 2,2,4-trimetilpentano y de 14% de heptano. El grado de octanaje de la gasolina se puede incrementar mediante la adición de tetraetilplomo (Et_4Pb), cuya función es controlar la concentración de radicales libres y evitar las explosiones prematuras que son características del picado. Por razones de protección medioambiental, el tetraetilplomo se ha venido sustituyendo por otros aditivos menos contaminantes, como el alcohol terbutílico y el metil terbutil éter.

4.3. Oxidación de alquenos.

Oxidación de alquenos.

Los alquenos se oxidan con formando dialcoholes:

Ejemplo:



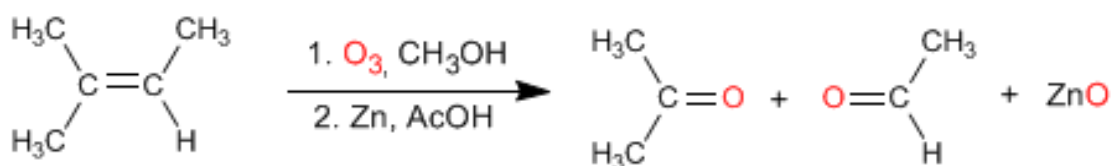
Si no se toman precauciones la oxidación puede ser más profunda y formarse aldehídos y/o cetonas.

4.5. Ruptura oxidativa con permanganato de potasio.

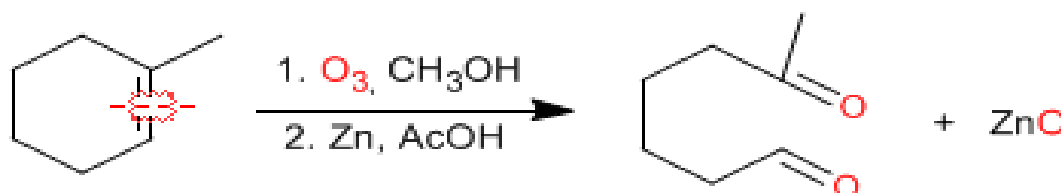
La reacción de un alqueno con permanganato de potasio (KMnO_4) en condiciones energéticas fuertes produce una ruptura considerable de la molécula de alqueno formando dos moléculas de ácido.

4.5. Ruptura oxidativa con ozono.

Los alquenos reaccionan con ozono para formar aldehídos, cetonas o mezclas de ambos después de una etapa de reducción.

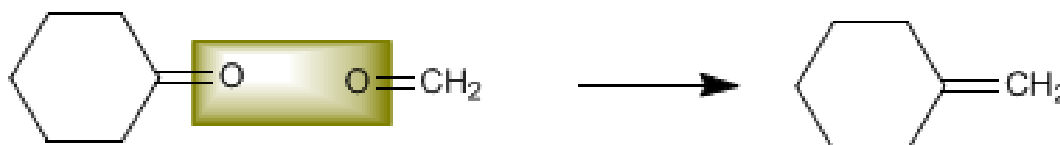


La ozonólisis rompe los alquenos, uniéndose cada carbono del alqueno a un oxígeno del ozono, el tercer oxígeno reacciona con el reductor.

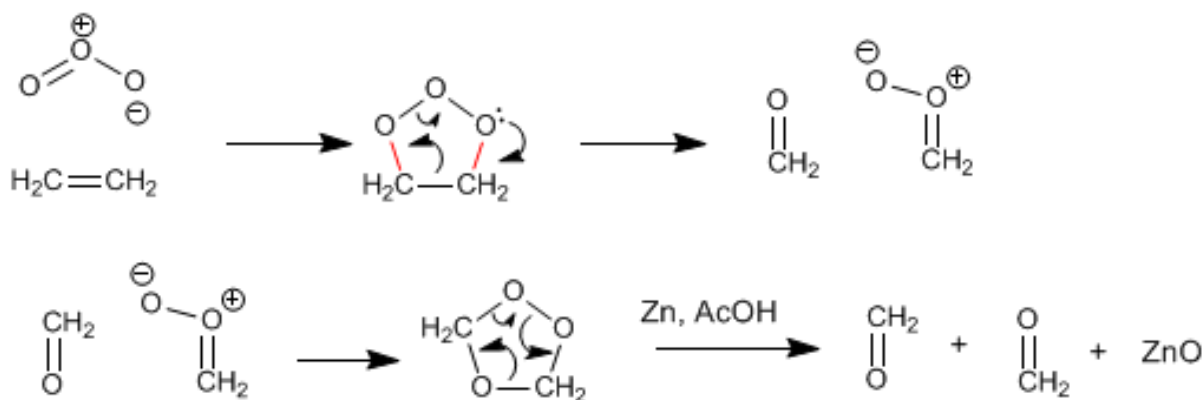


La ozonólisis es un método importante para preparar aldehídos y cetonas, pero también se puede utilizar como método analítico para determinar alquenos. Conocidos los productos de la ozonólisis se puede determinar la estructura del alqueno.

Determina la estructura del alqueno que produce ciclohexanona y metanal en relación equimolar al romper con ozono.



El mecanismo de la ozonólisis consiste en una reacción 1,3-dipolar entre el ozono (dipolo) y un alqueno (dipolarófilo) para formar el molozónido que rompe mediante la retro-1,3-dipolar generando nuevos dipolo y dipolarófilo, que mediante una nueva 1,3-dipolar forman el ozónido. El ozónido rompe en la etapa de reducción dejando libres los carbonilos.



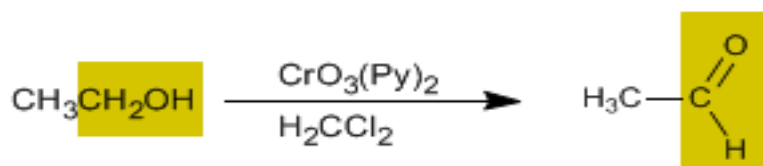
4.6. Oxidación de alquinos.

La oxidación en los alquinos causa una ruptura en el triple enlace y la formación de ácidos. Al oxidarlo se usa permanganato de potasio obteniendo ácido etanoico, ácido metanoico, bióxido de manganeso (precipitado de color carmelito), hidróxido de potasio y agua.

4.7. Oxidación de alcoholes.

La oxidación de alcoholes forma compuestos carbonilos. Al oxidar alcoholes primarios se obtienen aldehídos, mientras que la oxidación de alcoholes secundarios forma cetonas.

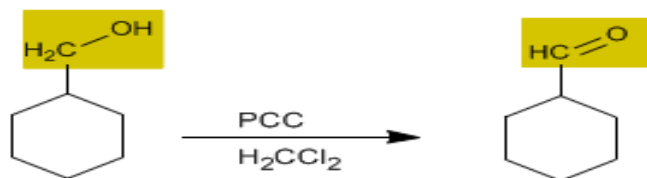
Oxidación de alcoholes primarios a aldehídos.



El trióxido de cromo con piridina en diclorometano permite aislar aldehídos con buen rendimiento a partir de alcoholes primarios.

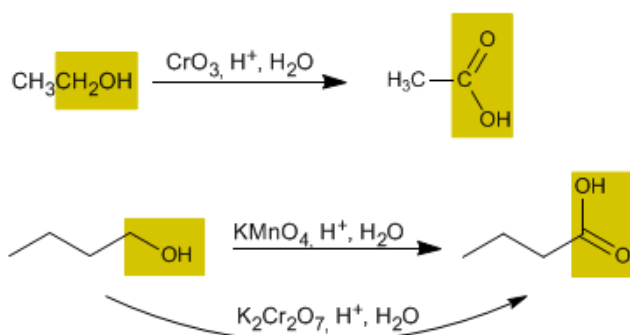
Se conoce como PCC (clorocromato de piridinio) al trióxido de cromo con piridina y ácido clorhídrico en diclorometano.

Este reactivo también convierte alcoholes primarios en aldehídos.



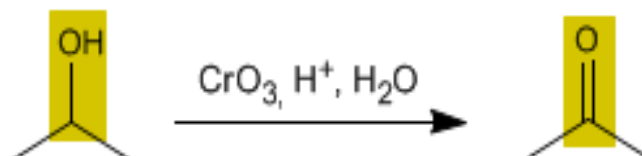
Oxidación de alcoholes primarios a ácidos carboxílicos

El trióxido de cromo en medio ácido acuoso (reactivo de Jones), el permanganato de potasio y el dicromato de potasio oxidan los alcoholes primarios a ácidos carboxílicos.



Oxidación de alcoholes secundarios a cetonas

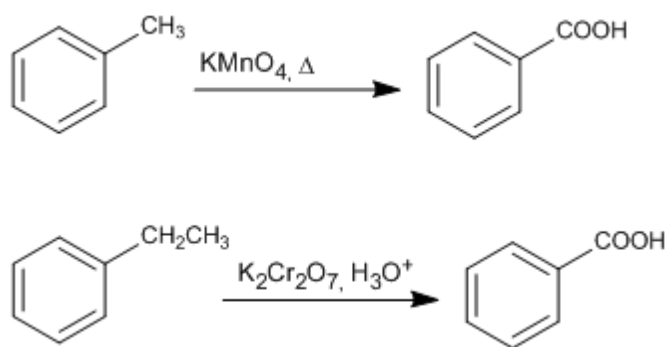
Los oxidantes convierten los alcoholes secundarios en cetonas. No es posible la sobre oxidación a ácido carboxílico.



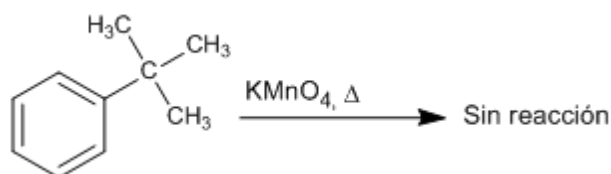
4.8. Oxidación de cadenas laterales de compuestos aromáticos.

Una cadena lateral en química orgánica y en bioquímica es un sustituyente o grupo químico unido a un grupo funcional o a la cadena principal de una molécula orgánica. Un grupo R es una etiqueta genérica para una cadena lateral

El permanganato y el dicromato de potasio en caliente oxidan alquilbencenos a ácidos benzoicos. Esta reacción sólo es posible si en la posición bencílica existe al menos un hidrógeno. No importa la longitud de las cadenas o si son ramificadas todas rompen por la posición bencílica generando el grupo carboxílico.



Sin hidrógenos en la posición bencílica no se produce la ruptura.



4.9. Oxidación de aminas.

Se pueden considerar a las aminas como compuestos nitrogenados derivados del amoníaco (:NH₃) en el que uno o más grupos alquilo o arilo están unidos al nitrógeno. El átomo de nitrógeno de la molécula de amoníaco contiene un par electrónico libre, de manera que la forma de esta molécula, considerando en ella al par de electrones no enlazantes, es tetraédrica ligeramente distorsionada. El par aislado de electrones no enlazantes ocupa una de las posiciones tetraédricas. El ángulo del enlace

H-N-H del amoníaco es de 107° , y tanto la forma de la molécula como el valor anterior se pueden explicar admitiendo una hibridación sp^3 en el átomo de nitrógeno. El par electrónico libre provoca una compresión del ángulo

que forman entre sí los orbitales híbridos sp^3 , reduciéndolo de 109° a 107° grados. En las aminas, como la trimetilamina ($(CH_3)_3N:$), el ángulo del enlace C-N-C no está tan comprimido como en el amoníaco porque los grupos alquilo, más voluminosos que los átomos de hidrógeno, abren ligeramente el ángulo, como se muestra a continuación.

N H H H 107° 108° N H₃C CH₃ CH₃
 amoníaco trimetilamina

La consecuencia más importante que cabría extraer de la hibridación sp^3 del átomo de nitrógeno de las aminas es que una amina, formada por tres sustituyentes distintos enlazados al átomo de nitrógeno, contendría un centro estereogénico y, en consecuencia, no se podría superponer con su imagen especular, y por tanto debería ser ópticamente activa. Sin embargo, una amina con tres sustituyentes diferentes no presenta actividad óptica debido a la interconversión de enantiómeros. Este fenómeno se conoce como inversión del nitrógeno, y se produce a través de un estado de transición en el que el átomo de nitrógeno presenta hibridación sp^2 y el par de electrones no enlazantes ocupa el orbital p.

Las aminas se pueden clasificar según el número de grupos alquilo que están unidos al nitrógeno. Si sólo hay uno, la amina es primaria. Si hay dos grupos, la amina es secundaria y si hay tres es terciaria.

Las aminas se oxidan con facilidad durante su almacenamiento cuando están en contacto con el aire.

La oxidación atmosférica es una de las razones por las que normalmente las aminas se convierten en sus sales de amonio para almacenarlas o usarlas como medicamentos.

La mayor parte de las aminas se oxidan con agentes oxidantes como H_2O_2 o ácido m-cloroperoxibenzoico.

Las aminas primarias se oxidan con mucha facilidad, pero con frecuencia se obtienen mezclas complejas de productos

Las aminas secundarias se oxidan fácilmente para dar hidroxilaminas, aunque también se forman varios subproductos y con frecuencia los rendimientos son bajos.

Las aminas terciarias se oxidan, con H_2O_2 o ácido m-cloroperoxibenzoico, a óxidos de amina con buenos rendimientos.

Debido a la carga positiva en el átomo de nitrógeno, los óxidos de amina pueden participar en reacciones de eliminación, denominadas reacciones de eliminación de Cope. El oxígeno

del óxido de amina es el centro básico que se requiere en el proceso de eliminación. La eliminación se efectúa a través de un estado de transición cíclico y transcurre, por lo general, con la misma orientación que la eliminación de Hofmann, proporcionando el alqueno menos sustituido.

LECTURAS DE APOYO

1. Morrison, Robert Thornton; Boyd, Robert Neilson. Química Orgánica. **Metáno: Estructura**. Editorial Addison Wesley Longman de México S.A. de C.V. Página 39.
2. Morrison, Robert Thornton; Boyd, Robert Neilson. Química Orgánica. Hidrocarburos. Editorial Addison Wesley Longman de México S.A. de C.V. Página 40 y siguientes.

VIDEOS DE APOYO

- **Conceptos básicos de químicas orgánica:**
<https://www.youtube.com/watch?v=vqGUvocEYAI>
- **Alcanos, alquenos y alquinos:**
<https://www.youtube.com/watch?v=wxcFaTPi03Y>

Hay diversos tipos de hidrocarburos, según como estén organizadas las moléculas formadas por átomos de carbono y de hidrógeno. En su mayoría tienen su origen en el petróleo y necesitan un procesamiento posterior para poder ser utilizados en sus distintas formas.

Las principales aplicaciones de los hidrocarburos se dan en el transporte, como combustible, y en la industria. Pero también cuentan con numerosos usos en otros campos.

Combustibles líquidos

Los combustibles llamados fósiles provienen del petróleo. Podemos definirlos como una clase de hidrocarburos que entran en combustión al calentarse en presencia de oxígeno.

Los más comunes hoy en día son los diferentes tipos de gasolina, el diésel y el queroseno. También son usados para toda la maquinaria industrial y para los generadores eléctricos.

La mayoría de los vehículos funcionan gracias a este tipo de combustible por lo que es, a día de hoy, insustituible.

Sin embargo, la contaminación que provoca y la previsión de su agotamiento, está dando lugar a que se investigue un posible sustituto a medio plazo.

Gas Natural

El gas natural está adquiriendo una creciente importancia en muchos campos, desde industriales hasta en distintos usos en el hogar.

Estos hidrocarburos gaseosos se extraen bien de yacimientos independientes o bien de otros asociados al petróleo.

En los últimos años se le está dando uso como combustible para el transporte. Existen vehículos que funcionan con metano o propano, siendo más económicos y menos contaminantes que los que necesitan gasolina o diésel.

Como aplicaciones domésticas se emplea en calefacción y cocinas. Por su parte, es ampliamente utilizado en la industria, desde las metalúrgicas hasta la fabricación de vidrio.

Elaboración de Plásticos

Otro de los usos que se le da a los hidrocarburos es la fabricación de plásticos. Para ello necesitan un procesado que tiene lugar en la industria petroquímica.

Los plásticos son unos de los materiales más presentes en la vida cotidiana, debido a su resistencia y a la posibilidad de darles multitud de formas.

Existen tres clases diferentes, dependiendo de su estructura química y de la manera que hayan sido fabricados: los termoendurecibles, los termoplásticos y los poliuretanos.

El plástico más utilizado es el polietileno, que podemos encontrar en productos tan comunes como bolsas, envases o cañerías.

Jabones y Cosméticos

Aunque en principio no asociamos los hidrocarburos a este tipo de artículos, lo cierto es que casi todas las cremas, jabones o productos cosméticos los llevan entre sus ingredientes.

Los compuestos más comunes son el mismo petróleo y el aceite mineral. Ambos son ampliamente utilizados en cremas hidratantes o lociones, dado que otorgan una sensación de suavidad.

Sin embargo, el uso de estas materias en artículos de belleza o de limpieza puede tener poco futuro. Las investigaciones de diversos organismos han advertido sobre sus posibles efectos negativos para la salud.

La propia Organización Mundial de la Salud recomienda no usar estos componentes, ya que podrían ser cancerígenos.

Insecticidas y plaguicidas

Los hidrocarburos son unos de los compuestos más presentes en los distintos tipos de insecticidas y plaguicidas.

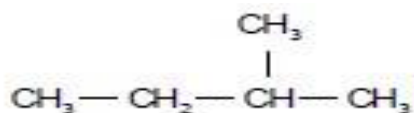
Su uso se remonta hasta la década de los 40 del pasado siglo. Fue entonces cuando se comenzaron a emplear los clorados para intentar erradicar las diferentes plagas que asolaban las cosechas.

Así nacen productos como el DDT o el dieldrín que demostraron una alta eficacia en este campo. Más tarde, nuevas investigaciones ampliaron enormemente el número de compuestos.

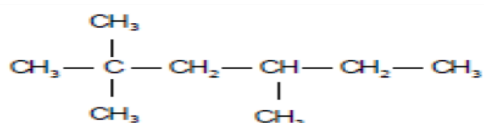
En los últimos años, sin embargo, se está tratando de eliminar su uso, ya que producen grandes daños medioambientales y pueden ser dañinos para la salud de los consumidores.

GUÍA DE EJERCICIOS DE NOMENCLATURA EN QUÍMICA ORGÁNICA

I. Indica cuántos carbonos primarios, secundarios, ternarios y cuaternarios existen en cada una de las estructuras.



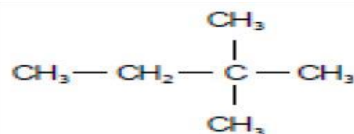
Primarios	
Secundarios	
Terciarios	
Cuaternarios	



Primarios	
Secundarios	
Terciarios	
Cuaternarios	



Primarios	
Secundarios	
Terciarios	
Cuaternarios	

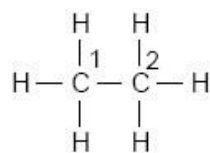


Primarios	
Secundarios	
Terciarios	
Cuaternarios	

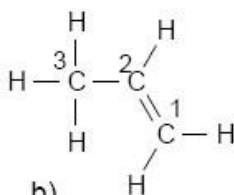
2. Escribe las estructuras de los siguientes alcanos ramificados:

- 2-metilpropano
- 2, 2, 3-trimetilbutano
- 3-etil-2,3-dimetilhexano
- 5-ter-butil-5-etil-3-isopropil-2,6-dimetiloctano
- 4-sec-butil-2,2,4,5,6-pentametilheptano
- 6-ter-butil-3,5,5-trietil-2,4-dimetilnonano
- 7-butil-6-isobutil-5-isopropil-3,8-dimetil-7-neopentil-6-propilundecano

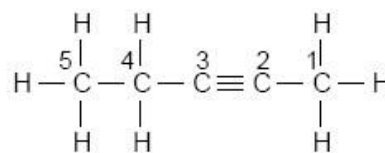
3. Indique el tipo de hibridación que presenta cada uno de los carbonos presentes en los siguientes compuestos.



a)



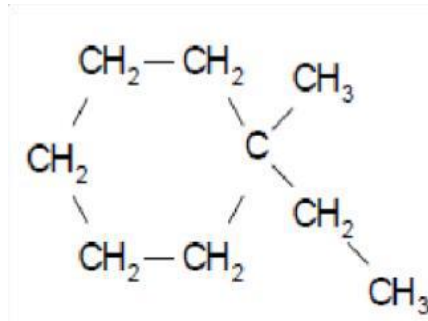
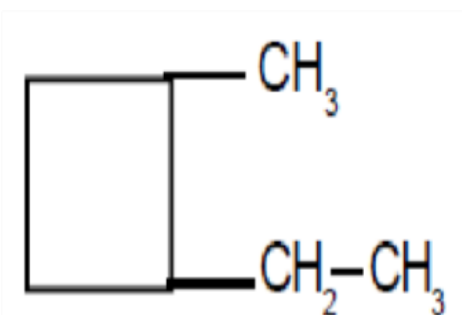
b)



c)

Compuesto	Carbono 1	Carbono 2	Carbono 3	Carbono 4	Carbono 5	
a						
b						
c						

4. Nombra los siguientes Cicloalcanos:



5. Escriba las estructuras de los siguientes compuestos:

- 3-ciclopentil-3-etilhexano
- Isopropilciclohexano
- Ciclohexilciclohexano
- 1,1,3-trimetilciclobutano
- 1,1,2,2-tetrametilciclopropano
- 1,2-dimetilciclohexano

- 1-metil-2-propilciclooctano

6.- Escriba la estructura de los siguientes alquenos:

- 5-etil-2,4,5-trimetil-3-hepteno
- 4-etil-3-isopropil-2-metil-3-hepteno
- 3-etil-4-isopropil-6,6-dimetil-3-hepteno
- 4-butil-5-isopropil-3,6-dimetil-3-octeno
- 7-terbutil-4-etil-9-isopropil-2,4,10-trimetil-6-neopentil-5-propil-2-undeceno

7. Escriba el nombre de los sig. Alquinos:

- 2,5-trimetil-3-heptino
- 3-metil-1-butino
- 4-dimetil-2-hexino
- 2,5,6-trimetil-3-octino
- 3-ter-butil-5-etil-1-heptino

SEGUNDA LECTURA DE APOYO

“Hidrocarburos: contaminación en el Caribe mexicano”

Elber José Sandoval Herazo y Manuel Alejandro Lizardi Jiménez Vol. 20, Núm. 1, enero-febrero 2019

Revista Digital Universitaria

Introducción

El Caribe mexicano está ubicado en la península de Yucatán, comprendiendo los territorios costeros y terrestres de los municipios de Lázaro Cárdenas, Benito Juárez, Tulum e Isla Mujeres, del estado de Quintana Roo (Comisión Nacional de Áreas Naturales Protegidas, 2016).

Es una región de importancia ecológica y económica (Davenport y Davenport, 2006). En ella se resguardan especies de gran relevancia ambiental, que ayudan a mantener el equilibrio de los distintos ecosistemas (Díaz-Ruiz, Aguirre-León, y Arias-González, 1998); la estabilidad de estos ecosistemas suele ser muy delicada y puede verse afectada gravemente por cambios mínimos en su ambiente.

Existe una gran variedad de compuestos dañinos para los ecosistemas, entre los cuales podemos encontrar los hidrocarburos, que son compuestos constituidos principalmente por carbono e hidrógeno, que pueden producirse de manera natural por efecto de diversos fenómenos como incendios forestales, erupciones volcánicas o diagénesis (comprende todos los cambios físicos, químicos o bioquímicos que ocurren en el sedimento o roca sedimentaria al depositarse por efecto de la circulación de un fluido). Sin embargo, las actividades humanas, principalmente la industrialización y la urbanización, producen una creciente cantidad de emisiones de hidrocarburos que indudablemente representan un problema ambiental serio (Tobiszewski y Namieśnik, 2012).

Los cuerpos de agua dulce en el Caribe mexicano se encuentran conectados a través de conductos subterráneos naturales que gracias a las lluvias terminan desembocando en las aguas de las playas, como parte de un proceso natural (Sánchez, Cervantes-Martínez y Herrera, 2015). Por consiguiente, cualquier daño que provoquemos puede esparcirse y contaminar otras zonas cercanas. Gracias al monitoreo en cuerpos de agua dulce de la Riviera Maya, en los últimos años se ha demostrado la presencia de hidrocarburos tóxicos y carcinogénicos (LeónBorges y Lizardi-Jiménez, 2017), potencialmente peligrosos para el ambiente y el ser humano, razón por la cual es necesario que conozcamos la importancia de los ecosistemas acuáticos y el impacto de los hidrocarburos en el Caribe mexicano.

Ecosistemas acuáticos representativos del Caribe mexicano El estado de Quintana Roo es el cuarto estado con mayor cantidad de recursos hídricos de México, 6 187.2 hectómetros cúbicos (hm³), lo que lo convierte en un estado de alta disponibilidad de agua.

La mayor parte del agua dulce proviene de yacimientos subterráneos (alrededor de 99.8%), mientras que sólo 0.2% representa el agua superficial (Pozo, 2011) Gobierno del Estado de Quintana Roo y Programa de Pequeñas Donaciones (PPD). En el Caribe mexicano podemos encontrar distintos tipos de cuerpos de agua como cenotes, manantiales y ojos de agua, los cuales se interconectan subterráneamente gracias de las cualidades geológicas del terreno cárstico (formado por la erosión producida por el agua).

Las características de este terreno facilitan que las aguas, generadas principalmente por lluvia, fluyan y escurran hacia el mar a través de zonas de manantiales y ojos de agua (Sánchez et al., 2015). Los manglares A lo largo del Caribe mexicano podemos observar ecosistemas acuáticos de vital importancia como manglares, pastos marinos y arrecifes de coral. Los manglares son ecosistemas compuestos por mangles, plantas con adaptaciones que les permiten crecer en terrenos inundados,

donde existe un ingreso de agua salada. En este grupo de plantas se pueden encontrar especies de distintos géneros taxonómicos que comparten adaptaciones semejantes, que cumplen ese mismo objetivo (Álvarez, 2009).

Los manglares son barreras naturales contra el viento y las mareas, producen gran variedad de nutrientes, que con las mareas son transportados a las costas; también albergan y sirven de protección a crías de especies de peces que consumimos como el bagre, la mojarra o el róbalo. Son los primeros en tener contacto con los contaminantes y tierra que acarrearán las corrientes de ríos y arroyos, actuando como barrera protectora de los arrecifes de coral (Comisión Nacional para el Conocimiento y Uso de la Biodiversidad, 2009).

La alta productividad y abundancia en detritus orgánico (residuos sólidos provenientes de la descomposición de materia vegetal y animal) de los manglares los hace propensos a la acumulación de hidrocarburos (Olguín,

Hernández, y Sánchez Galván, 2007); razón por la cual será necesario que pasen décadas antes de la recuperación total de los derrames ocurridos en los manglares de los municipios de Altamira y Aldama, Tamaulipas en el año 2018. Los arrecifes de coral México pertenece al Gran Cinturón de Arrecifes del Caribe, la segunda formación de arrecife más grande del mundo, de aproximadamente 350 Km de extensión, la cual parte desde las inmediaciones de Cancún, extendiéndose hacia el sur intermitentemente hasta el arrecife de Xcalak. Estos arrecifes coralinos están formados principalmente por arrecifes adyacentes a la línea de la costa peninsular (figura 4), sólo siendo separados de ésta por una laguna somera (Chávez-Hidalgo, 2009).

Los arrecifes de coral ayudan a mantener las poblaciones de peces comerciales, sirviéndoles de alimento y refugio; son un gran atractivo para el turismo; brindan protección a las poblaciones costeras contra tsunamis, tormentas y huracanes —como el huracán Willa, que tras su paso dejó gran cantidad de daños materiales y provocó la evacuación de miles de personas en México—; y en ellos coexisten más de 100 000 especies distintas, que incluyen especies en vía de extinción como tortugas marinas, langostas y tiburones (Moguel-Archila y Martínez de Lemos, 2015). Los arrecifes de coral son ecosistemas muy sensibles, que al entrar en interacción con hidrocarburos su crecimiento y desarrollo se ve afectado significativamente (Guzmán, Burns, y Jackson, 1994).

Un ejemplo es el trágico derrame de petróleo de Deepwater Horizon de 2010 en el Golfo de México, donde se observaron daños en los corales incluso a 11 Km del sitio de explosión y a más de

l 370 m de profundidad, sitios donde sólo sobreviven los corales de aguas más profundas (White et al., 2012).

Las praderas de pastos marinos Las praderas de pastos marinos están compuestas de plantas vasculares (plantas que presentan vasos que facilitan el paso de nutrientes y agua a través de su interior), con flor y fruto, que guardan muchas similitudes con las plantas terrestres, con adaptaciones morfológicas y fisiológicas que les permiten sobrevivir bajo el agua de mar; estas plantas son muy exitosas en las zonas costeras y su hábitat está ubicado principalmente en aguas de una profundidad no superior a diez metros (López-Caldeón y Riosmena-Rodríguez, 2010).

En el Caribe mexicano se identifican tres especies de pastos marinos: *Halodule wrightii*, *Thalassia testudinum* y *Syringodium filiforme* (Gutiérrez-Aguirre, De La FuenteBetancourt, y Cervantes-Martínez, 2000). De los beneficios que brindan podemos encontrar que constituyen una fuente de alimento significativa para animales vertebrados, son capaces de atrapar gran cantidad de sedimento provocando que el agua sea más cristalina (Ferrera-Cerrato, Rojas-Avelizapa, Poggi-Varaldo, Alarcón, y Cañizares-Villanueva, 2006), dan solidez a los cimientos reduciendo la erosión, y contribuyen en la masa relativa de una considerable variedad de organismos.

Las principales amenazas que enfrentan los pastos marinos por nuestra causa son la sobreexplotación pesquera, el desarrollo del turismo en las costas y la industrialización (LópezCaldeón y Riosmena-Rodríguez, 2010), actividades que están relacionadas con la contaminación por hidrocarburos.

Estudios sobre contaminación por hidrocarburos en el Caribe mexicano A pesar de ser un área con tan importantes recursos hídricos y biológicos, existen pocos estudios sobre la condición de contaminación en el Caribe mexicano que nos permitan tener una perspectiva amplia del estado actual de los cuerpos de agua, en cuanto a hidrocarburos respecta (León-Borges y Lizardi-Jiménez, 2017). Se sabe que la contaminación por hidrocarburos está fuertemente influenciada por la presión de las actividades que ejercemos en la zona con las que introducimos posibles vectores de contaminación, como los vehículos automotores que utilizan gasolina o diésel como combustible, embarcaciones, calefacciones, construcción de carreteras de asfalto, entre otros (Abdel-Shafy y Mansour, 2016). Los estudios sobre hidrocarburos en el Caribe mexicano han contribuido en el establecimiento de nuevas áreas naturales protegidas, como el caso del trabajo publicado en 2014 por Medina Moreno, donde se estudiaron hidrocarburos en las aguas de los cenotes a lo largo del estado de Quintana Roo (Medina-Moreno, Jiménez-González, Gutiérrez-Rojas, y Lizardi-Jiménez, 2014).

En los estudios realizados durante los años 2012 a 2015 se encontraron en las áreas de Cancún, Playa del Carmen e isla Holbox la presencia de los siguientes hidrocarburos: naftaleno, fenantreno, pireno y benzo(a)pireno; antraceno en 2013 y 2015; benceno en 2012, 2014 y 2015; y hexadecano en 2012 y 2014. Se identificaron como principales fuentes de estos hidrocarburos la contaminación generada por el asfalto (León-Borges y Lizardi-Jiménez, 2017), que está compuesto por hidrocarburos tóxicos como el naftaleno, fluoreno, pireno, benzo(a) pireno y benzo(a) antraceno (los dos últimos potencialmente cancerígenos) (Brantley y Townsend, 1999). Estos datos son importantes para la identificación de fuentes de contaminación y la generación de alternativas de biorremediación.

En la actualidad en nuestro grupo de trabajo (conacyt-Instituto Tecnológico Superior de Tierra Blanca) estamos investigando la contaminación por hidrocarburos en las costas de Cancún en 2018, teniendo en cuenta el efecto de la actividad turística. Conclusiones El Caribe mexicano es una región muy importante para México por sus recursos, tanto a nivel social como económico. Los ecosistemas del Caribe mexicano como manglares, pastos marinos y arrecifes de coral son muy importantes para la conservación de gran número de especies y para mitigar el efecto de algunos fenómenos naturales como huracanes o erosión. Con base en los resultados hallados en investigaciones recientes en cenotes de la Riviera Maya se ha conseguido identificar uno de los posibles contaminantes de los cuerpos de agua: el asfalto, que contiene hidrocarburos potencialmente peligrosos, como el benzo(a) pireno.

Es importante, tanto para la preservación de los ecosistemas como para nuestra salud, conocer el estado actual de contaminación por hidrocarburos en las aguas del Caribe mexicano, como mecanismo de prevención o punto de partida para proponer alternativas de remediación.

BIBLIOGRAFÍA

- Fox, M.A. y Whitesell, J.K., Química Orgánica, 2ª. Edición, México, Ed. Pearson Educación, 2000.
- Morrison, R.T. y Boyd, R.N., Química Orgánica, 5ª. Edición, México, Ed. Addison Wesley Longman de México, S.A. de C.V., 1998.
- Masterton, William., Slowinski, Emil., Staninski, Conrad. Química General Superior. Interamericana, McGraw-Hill. México.
- McMurry, J., Química Orgánica, 5ª. Edición, México, Ed. International Thomson Editores, S.A. de C.V., 2001.
- Wade, L.G. Jr., Química Orgánica, 2ª. Edición, México, Ed. Prentice Hall Hispanoamericana, S.A. de C.V., 1993.

FUENTE ALTERNATIVA:

- Sandoval Herazo, Elber José y Lizardi Jiménez, Manuel Alejandro (2019). Hidrocarburos: contaminación en el Caribe mexicano. Revista Digital Universitaria (rdu). Vol. 20, núm. 1 enero-febrero.