

## Tema 2 : INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA ORGÁNICA

### Objetivos:

- Analizar los conceptos fundamentales de la química orgánica.
- Identificar los enlaces en las moléculas orgánicas.
- Distinguir entre los diferentes tipos de fuerzas que interactúan, en las moléculas orgánicas y su influencia sobre las propiedades físicas (punto de fusión, ebullición y solubilidad).
- Familiarizarse con las diferentes formas de representación de las moléculas orgánicas

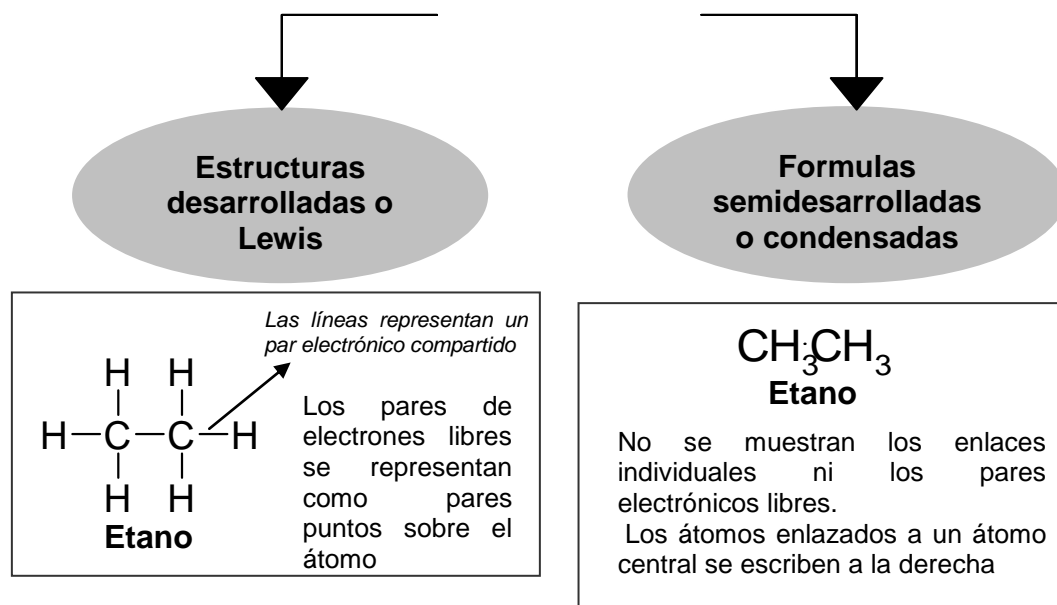
### MARCO TEORICO

#### Representación de las moléculas Orgánicas

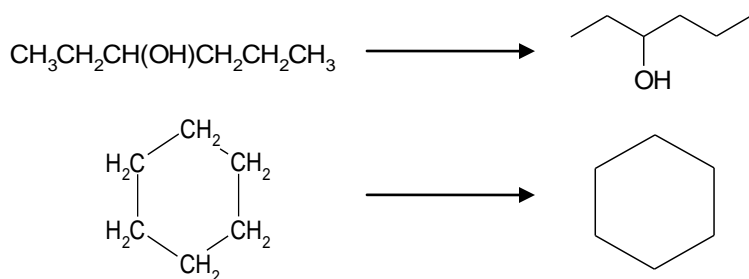
La mayor parte de las moléculas de los compuestos orgánicos son tridimensionales. Por lo tanto, el aspecto “espacial” resulta de fundamental importancia para 1) entender las estructuras de las moléculas, y 2) representarlas.

El hecho de que debamos realizar su representación en un plano (papel, pizarrón, etc.) requiere establecer ciertas convenciones.

Hay varias maneras de representar moléculas orgánicas (también inorgánicas...).



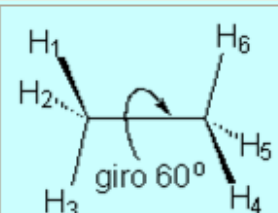
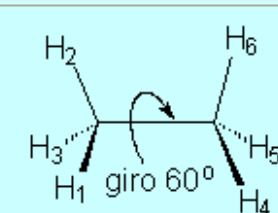
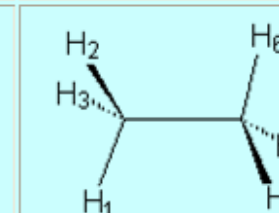
- **Formula molecular o condensada** C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>O
- **Formula simplificada:** cada extremo de una línea de enlace representa 1 Carbono donde no se muestra su símbolo ni los Hidrógenos.



En los casos anteriores nada se nos muestra sobre la distribución de los átomos en el espacio. Es frecuente que se necesite representar una estructura molecular “en 3D” para expresar por ejemplo la cercanía, o la lejanía, de dos partes de la estructura, o simplemente para expresar la forma de la molécula que se considera. Para este fin, veremos tres tipos de representación espacial más usados. En todos ellos, por lo general los átomos de C quedan implícitos en los puntos en que se encuentran dos o más enlaces.

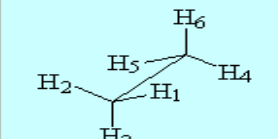
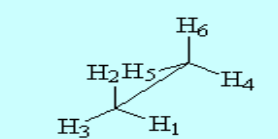
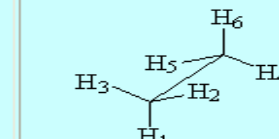
### 1- Representación en perspectiva

Para representar una estructura molecular en perspectiva, se emplean tres tipos de líneas: **continuas** para simbolizar *enlaces situados en el mismo plano en que se dibuja* (por ejemplo en el plano del papel); líneas **de trazos o cuñas vacías**, que significan *enlaces que se dirigen hacia atrás del papel*, alejándose del observador; y **cuñas llenas**, que representan *enlaces que se dirigen hacia el observador*, y que a medida que se acercan son más gruesas.

Representación	Alternadas	Eclipsadas	Alternadas
<b>Cuñas y trazos</b>			

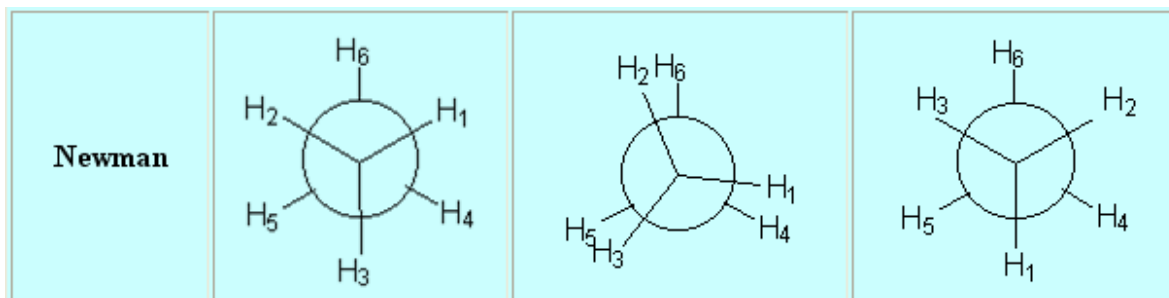
### 2- Representación en caballete

En estas fórmulas todas las líneas son continuas, pero el enlace de interés (la parte de la molécula que nos interesa estudiar “en tres dimensiones”) se ubica en diagonal, entendiéndose que el átomo de abajo (enlazado por la diagonal) está más cerca de nosotros; obviamente el de arriba está más alejado.

<b>Caballete</b>			
------------------	---	--	---

### 3- Representación de Newman

Este formalismo tiene en cuenta la representación en perspectiva de sólo un enlace de la molécula que se considera. Ese enlace une dos átomos –que generalmente son de carbono– de los cuales **el de atrás, se representa como un círculo; y el de adelante, como un punto en el centro del círculo**. En este caso, el enlace de interés no se ve; la molécula se representa de la manera en que la verías desde un extremo, de modo que el C de adelante justo tape al de atrás. De cada uno de los átomos representados, salen radialmente los otros enlaces que forma cada uno de esos dos átomos:



### Hibridaciones del carbono- orbitales moleculares

[Leer Capítulo 2 Libro introducción a la química orgánica. Autino, Rommanelli (pag 18 a 26) ]

#### TIPOS DE CARBONO

**PRIMARIO**.- Está unido a un solo átomo de carbono.

Los C's **rojo** son primarios porque están unidos a un solo carbono, el de color **azul**?

Ejemplo:  
 $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_3$

**SECUNDARIO**.- Está unido a 2 C's

El C **rojo** es secundario porque está unido a dos átomos de C.

Ejemplo:  
 $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_3$

**TERCIARIO**.- Está unidos a 3 C's.

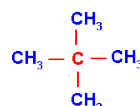
El C **rojo** es terciario porque está unido a tres C's.

Ejemplo:  $\text{CH}_3\text{-CH(CH}_3\text{)-CH}_3$

**CUATERNARIO**.- Está unido a 4 C's.

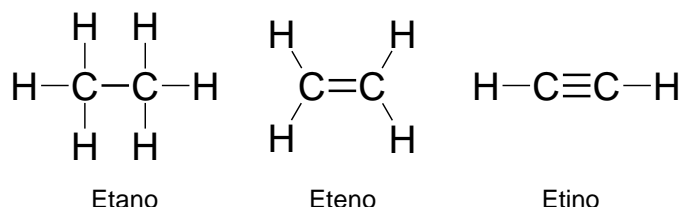
El C **rojo** es cuaternario porque está unido a 4 átomos de carbonos, los de color **azul**.

Ejemplo:



## POLARIDAD DE ENLACE

Los átomos de carbono tienen la mitad del octeto electrónico. Como no son capaces ni de ganar cuatro electrones más ni de perder los que tienen, comúnmente forman enlaces covalentes y comparten electrones con otros átomos o entre sí mediante enlaces simples, dobles o triples.

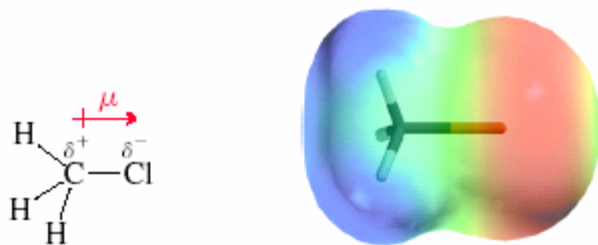


Los enlaces covalentes no solo se forman entre átomos idénticos (C-C) sino también entre átomos diferentes (C-H, C-Cl) que no difieren mucho en su electronegatividad. De acuerdo con esto los enlaces covalentes pueden ser de dos tipos:

**Enlaces covalentes apolares:** donde los electrones compartidos son igualmente atraídos por ambos núcleos y la molécula resultante no presenta distribución apreciable de cargas.

**Enlaces covalentes polares:** donde los electrones compartidos son atraídos de modo diferente por los dos núcleos y por lo tanto la molécula presenta una zona de carga negativa y una zona cargada positivamente sobre el otro.

Se forma, entonces, un dipolo eléctrico que puede representarse de la siguiente manera:



H
2.1

Grupo 1 A	Grupo 2 A
Li	Be

Grupo 3 A	Grupo 4 A	Grupo 5 A	Grupo 6 A	Grupo 7 A
B	C	N	O	F

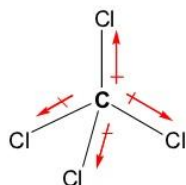
1.0	1.5
Na	Mg
0.9	1.2
K	Ca
0.8	1.0
Rb	Sr
0.8	1.0
Cs	Ba
0.7	0.9

2.0	2.5	3.0	3.5	4.0
Al	Si	P	S	Cl
1.5	1.8	2.1	2.5	3.0
Ga	Ge	As	Se	Br
1.6	1.8	2.0	2.4	2.8
In	Sn	Sb	Te	I
1.7	1.8	1.9	2.1	2.5
Tl	Pb	Bi	Po	At
1.8	1.9	1.9	2.0	2.1

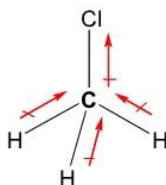
En las molec. Orgánicas no existe prácticamente  $\Delta X$  (diferencia de electronegatividad) entre el H y C; por lo tanto la existencia de un enlace polar causa que la molec. sea polar; esta polaridad se visualiza mediante vectores de momento dipolar ( $\mu$ ) apunta siempre hacia el extremo negativo del dipolo; que se suman y cuya resultante puede ser cero o distinta de cero.

#### Polaridad de moléculas

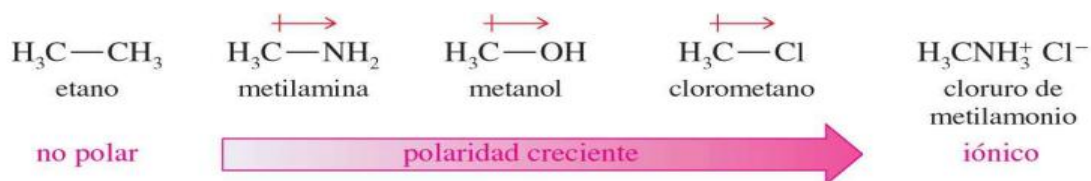
Momento dipolar ( $\mu$ )



Tetracloruro de carbono  
 $\mu = 0 \text{ D}$



Clorometano  
 $\mu = 1,86 \text{ D}$



### ❖ Fuerzas intermoleculares

Los puntos de fusión, ebullición y solubilidad de los compuestos orgánicos dependen del tipo de interacción que exista entre las moléculas. De acuerdo al tipo de moléculas existen diferentes clases de **fuerzas intermoleculares**:

**Fuerzas de London:** son las únicas fuerzas que unen las moléculas no polares y surge a raíz de la generación de momentos dipolares temporales

**Fuerzas dipolo-dipolo:** se dan entre moléculas polares y responden a las leyes de la electrostática (los polos positivos atraen a los negativos y viceversa)

**Enlaces por puente de hidrógeno:** son las que actúan entre moléculas covalentes en las que existen átomos de hidrógeno unidos a átomos especialmente electronegativos (F, O, N).

### Electronegatividad y efectos electrónicos

Las propiedades Físicas, Químicas y biológicas de los compuestos Orgánicos. Se originan en la distribución interna de sus cargas parciales en las moléculas-, como Consecuencia de los efectos electrónicos.

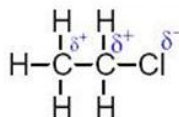
Los efectos electrónicos son los Responsables de la disposición de los electrones en las moléculas. Los principales efectos electrónicos a considerar son:

#### - EFECTO INDUCTIVO

Es la distribución de cargas parciales a lo largo de la cadena carbonada q se propaga por los enlaces  $\sigma$  hasta 3 enlaces. Existe en todas las molec polares



#### Efectos inductivos en el cloroetano



Aquellos átomos o grupos de átomos que atraen hacia ellos a los electrones compartidos con el C ejercen **efecto inductivo negativo,  $-I$** . Y a la inversa, ciertos átomos o grupos de átomos unidos al C presentan el efecto contrario, es decir, tienden a cederlos, ejerciendo, por tanto, un **efecto inductivo positivo,  $+I$** . Se considera que el efecto inductivo del átomo H es despreciable.

Efecto	Especie química sustituyente					
$-I$	$-\text{NO}_2$	$-\text{C}\equiv\text{N}$	$-\text{COOH}$	$-\text{X}$	$-\text{OCH}_3$	$-\text{OH}$
$+I$	$-\text{O}^-$	$-\text{COO}^-$	$-\text{C}(\text{CH}_3)$	$-\text{C}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$

#### - EFECTO DE RESONANCIA

Existen ciertas moléculas en las cuales es posible escribir dos o más estructuras de Lewis que difieren únicamente en la posición **de los electrones**. Ante esta situación: ¿Cuál es la estructura correcta de la molécula? En realidad la molécula suele mostrar características de todas las estructuras posibles las cuales se conocen como **estructuras resonantes** y se dice que la molécula es un **híbrido de resonancia** de las estructuras resonantes.

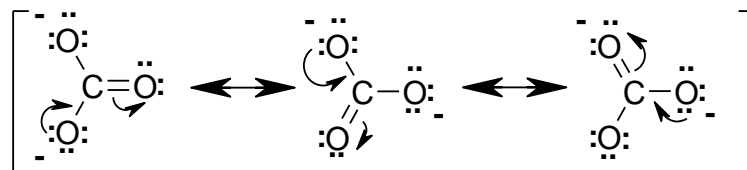
Las estructuras de resonancia permiten saber, de forma cualitativa, la estabilización que puede conseguir una molécula por deslocalización electrónica. Cuanto mayor sea el número de estructuras resonantes mediante las que se pueda describir una especie química mayor será su estabilidad.

#### ¿Cómo se escriben las estructuras de resonancia?

Para dibujar correctamente las estructuras resonantes de un compuesto conviene seguir las siguientes reglas:

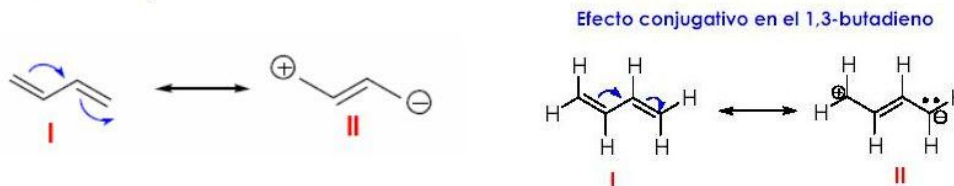
1. Dibujar una estructura de Lewis para el compuesto en cuestión sin olvidar los pares de electrones no compartidos (los que no participan en el enlace).
2. Tomando como base la estructura de Lewis acabada de dibujar se dibuja otra estructura de Lewis de manera que:
  - a) Todos los núcleos mantengan su posición original.
  - b) Se mantenga el mismo número de electrones apareados.

A continuación se aplican estas reglas para el dibujo de las estructuras resonantes del ion carbonato:



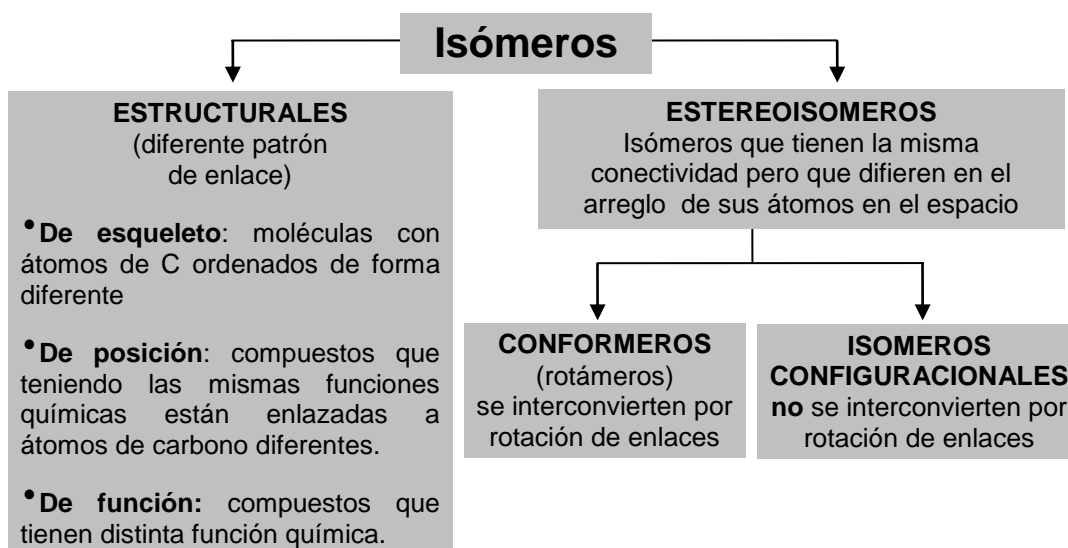
Las flechas **curvas** muestran el **movimiento de los electrones**, comienzan en la posición inicial de los electrones y terminan en su posición final. (*el movimiento va hacia el átomo más electronegativo*), en este caso el oxígeno.

→ **Efecto mesómero o resonancia:** “Desplazamiento del par de electrones “ $\pi$ ” de un doble o triple enlace hacia uno de los átomos por la presencia de pares electrónicos cercanos (dobles o triples enlaces)”.



### ❖ Isomería

La formula molecular de una sustancia indica el numero de átomos diferentes que están presentes, pero la formula estructural indica la manera que están ubicados dichos átomos. En algunas ocasiones es posible acomodar los mismos átomos en más de una forma. Las moléculas que contienen el mismo tipo y número de átomos, pero con diferentes ordenamientos, se llaman **isómeros**. **Estos compuestos pueden diferir en sus propiedades físicas (por ejemplo en el punto de ebullición), como así en la forma en la que reaccionan frente a un mismo compuesto (sus propiedades químicas).** Existen muchas clases de isomería, en el esquema se resumen los diferentes tipos de isómeros:

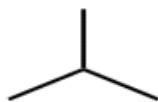




Isómeros de fórmula  $C_4H_{10}$



Butano

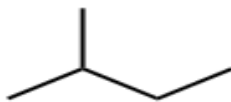


2-Metilpropano

Isómeros de fórmula  $C_5H_{12}$



Pentano



2-Metilbutano



2,2-Dimetilpropano

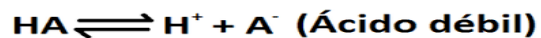
Isómeros de cadena o esqueleto

❖ **REACTIVOS Y REACCIONES ORGANICAS**  
**REACTIVOS**

a- **ACIDOS**, pueden ser:

- próticos- producen  $H^+$  ( $HNO_3$ ,  $HCl$ )
- Lewis – tienen un átomo central con octeto incompleto ( $AlCl_3$ ,  $ZnCl_2$ )

BASES: moléculas que tienen al menos 1 par de electrones no compartidos ( $H_2O$ ,  $OH^-$ ,  $NH_3$ )



**b- RADICALES LIBRES O RADICALES ( $Z^\bullet$ )**

POSEEN 1 electrón desapareado son altamente energéticos, muy reactivos y de vida media breve. Ej.  $HO^\bullet$ ,  $Cl^\bullet$

**c- REDUCTORES**

Son metales activos,  $H_2$ , hidruros que reducen dobles y triples enlaces ( $LiAlH_4$ ,  $NaBH_2$ )

#### d- OXIDANTES

Compuestos con estado de oxidación elevados afines por especies con electrones fácilmente accesibles para poder reducirse y estabilizarse

Ej. Permanganato, dicromato, oxígeno, peróxidos.

**e-CATIONES** pueden ser:

- Con octeto completo:  $NH_4^+$  o incompleto:  $Cl^+$
- CARBOCATIONES: moléculas con átomos de carbono con carga positiva ( $C^+$ ) pueden ser primarios, secundarios o terciarios ( $1^\circ$ ,  $2^\circ$  Y  $3^\circ$ )

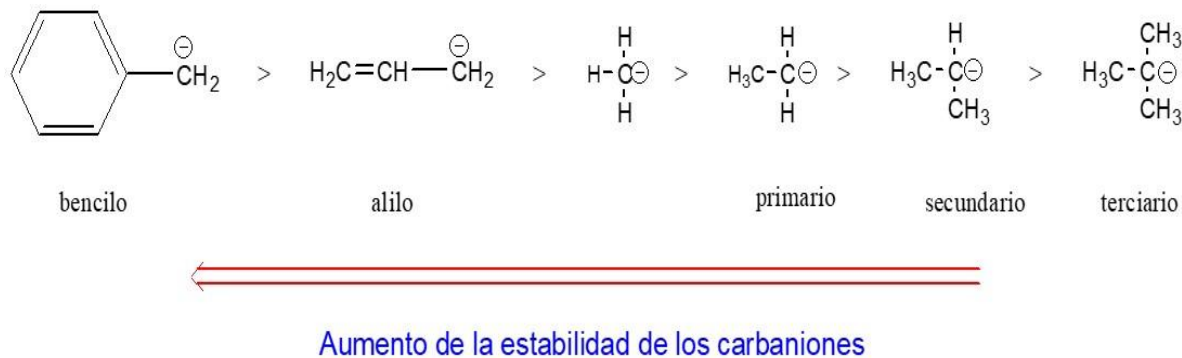
Cuanto más distribuida esta la carga en cualquier ión más estable es el ión y menos energía requiere para formarse.

$3^\circ > 2^\circ > 1^\circ$  (orden de más estable a menos estable)



#### f-Carbaniones

- Tienen un par de electrones no compartidos sobre el Carbono.
- Son bases fuertes ejemplo:  $:CH_3^-$



#### g- ELECTROFILOS ( $E^+$ )

Especies Afín por electrones tienen un átomo con octeto incompleto. Pueden tener Carga positiva ( $Cl^+$ ,  $H^+$ ) o ser neutros ( $SO_2$ ,  $SO_3$ )

## CLASIFICACIÓN DE LAS REACCIONES ORGÁNICAS

- **Sustitución:** Un grupo entra y otro sale.
 
$$\text{CH}_3\text{-Cl} + \text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{CH}_3\text{-OH} + \text{HCl}$$
- **Adición (a un doble o triple enlace).**

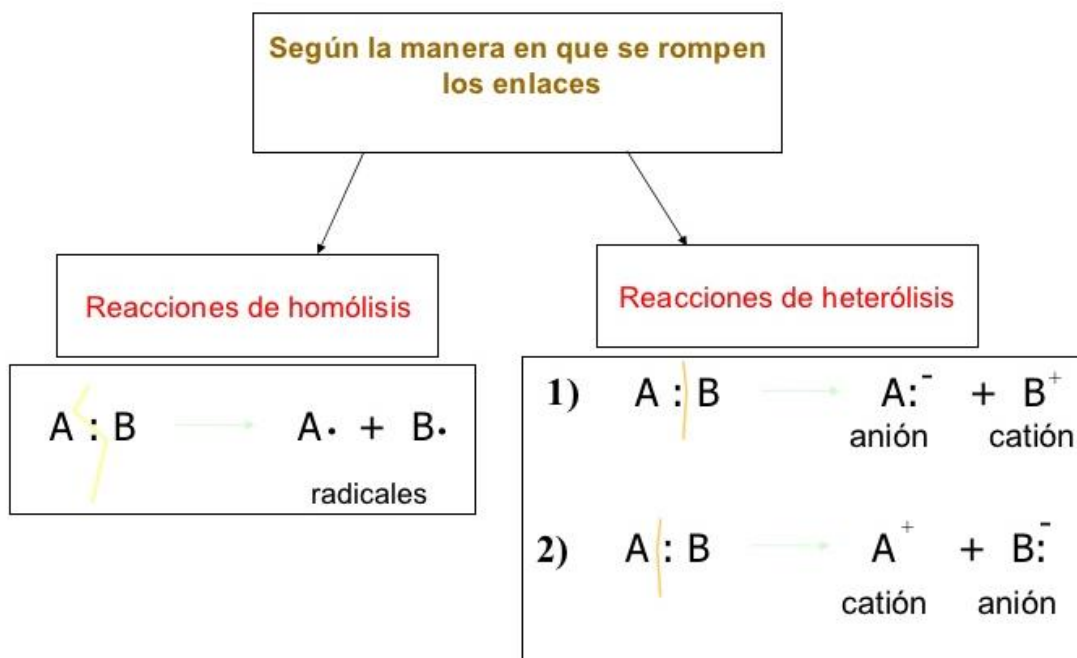
$$\text{CH}_2=\text{CH}_2 + \text{Cl}_2 \Rightarrow \text{CH}_2\text{Cl-CH}_2\text{Cl}$$
- **Eliminación: (de un grupo de átomos) formándose un doble o triple enlace.**  $\text{R-COOH} + \text{R}'\text{-OH} \leftrightarrow \text{R-CO-O-R}' + \text{H}_2\text{O}$ 

$$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{OH} \Rightarrow \text{CH}_2=\text{CH}_2 + \text{H}_2\text{O}$$
- **Redox:** Si cambia el estado de oxidación del carbono.
 
$$\text{CH}_3\text{OH} + \frac{1}{2} \text{O}_2 \Rightarrow \text{HCHO} + \text{H}_2\text{O}$$

**Otras reacciones orgánicas:**

- **Esterificación (hidrólisis ácida):**  $\text{R-COOH} + \text{R}'\text{-OH} \leftrightarrow \text{R-CO-O-R}' + \text{H}_2\text{O}$
- **Saponificación (hidrólisis básica)**
- **POLIMERIZACIÓN: Condensación**

$$\begin{array}{c} \text{CH}_2\text{-O-CO-R} \\ | \\ \text{CH-O-CO-R}' + 3 \text{ NaOH} \\ | \\ \text{CH}_2\text{-O-CO-R}'' \end{array}$$



## Según la naturaleza del reactivo atacante:

Un reactivo deficiente en e- atacará centros ricos en e-. Se lo denomina **electrófilo**.

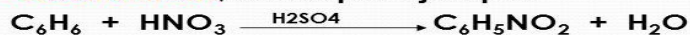
\*Un reactivo rico en e-, atacará centros deficientes en e-. Se lo denomina **nucleófilo**.

Las reacciones se pueden clasificar entonces en:

- **Nucleofílicas**, como por ejemplo:

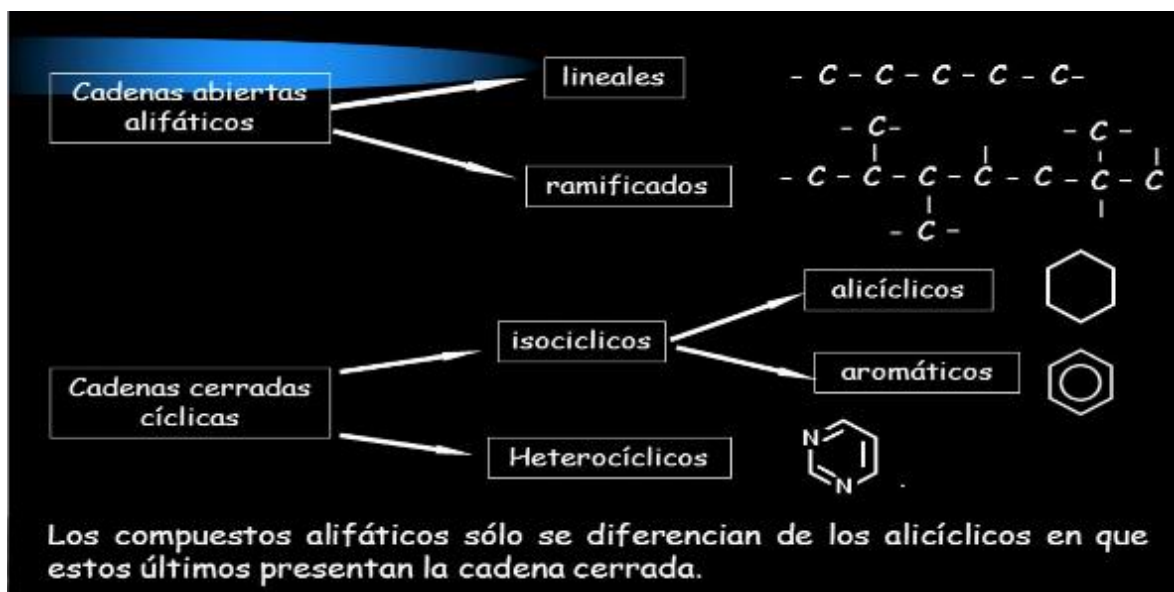


- **Electrofílicas**, como por ejemplo:



Para ampliar el tema lea el capítulo 2 completo del libro introducción a la química orgánica de Autino y Rommanelli.

## TIPOS DE CADENAS CARBONADAS



## HIDROCARBUROS

Son compuestos orgánicos formados únicamente por átomos de carbono e hidrógeno. Los hidrocarburos son ejemplos de hidruros del grupo 14. Debido a que el carbono tiene 4 electrones en su capa más externa (y debido a que cada enlace covalente requiere una donación de 1 electrón, por átomo, para la formación del enlace) por lo tanto el carbono tiene exactamente cuatro enlaces que hacer, y solo es estable si se usan los 4 de estos enlaces (tetravalencia del carbono). Pueden ser simples, dobles o triples.

La mayoría de los hidrocarburos encontrados en la Tierra ocurren naturalmente en petróleo crudo, donde la materia orgánica descompuesta proporciona una abundancia de carbono e hidrógeno que, cuando se une, puede unirse para formar cadenas (catenación) aparentemente ilimitadas.

## CLASIFICACIÓN DE HIDROCARBUROS

