

Tema 9: Nociones de química orgánica

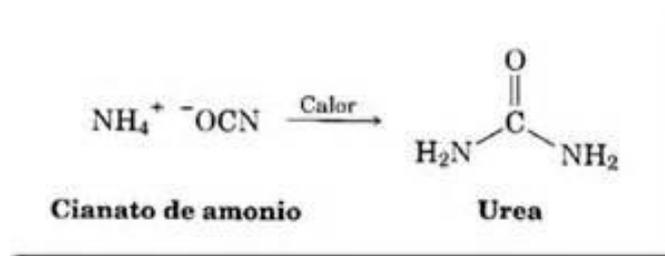
- 9.1 Introducción
- 9.2 El carbono
 - 9.2.1 Hibridación
- 9.3 Grupos funcionales
- 9.4 Estados de oxidación del carbono
- 9.5 Nucleofilia y electrofilia en química orgánica
- 9.6 Tipos de reacciones y mecanismos de reacción en química orgánica.
- 9.7 Nomenclatura (en clase)



Introducción

La química orgánica es la disciplina que estudia la estructura, propiedades, síntesis y reactividad de compuestos químicos formados principalmente por carbono e hidrógeno, los cuales pueden contener otros elementos, generalmente en pequeña cantidad, como oxígeno, azufre, nitrógeno, halógenos y fósforo, entre otros.

La síntesis de compuestos es una de las partes más importantes de la química orgánica. La primera síntesis orgánica data de 1828, cuando Friedrich Wöhler obtuvo urea a partir de cianato amónico. Desde entonces más de 10 millones de compuestos orgánicos han sido sintetizados a partir de compuestos más simples, tanto orgánicos como inorgánicos.



Los seres vivos estamos formados por moléculas orgánicas, proteínas, ácidos nucleicos, azúcares y grasas. Todos ellos son compuestos cuya base principal es el carbono. Los productos orgánicos están presentes en todos los aspectos de nuestra vida: la ropa que vestimos, los jabones, champús, desodorantes, medicinas, perfumes, utensilios de cocina, la comida, etc.

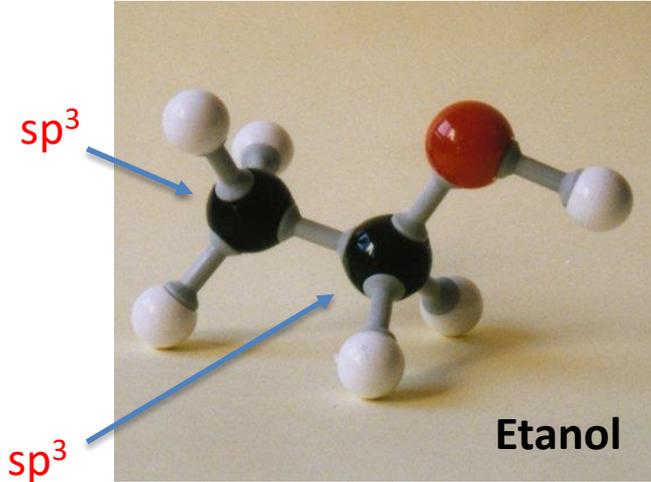
El carbono

La gran versatilidad de los compuestos orgánicos reside en la capacidad de combinación del carbono, que puede combinarse con hasta cuatro átomos diferentes, generando así a su alrededor 4 pares de electrones (octeto). Estos pares pueden disponerse (excepción hecha de los **carbenos**):

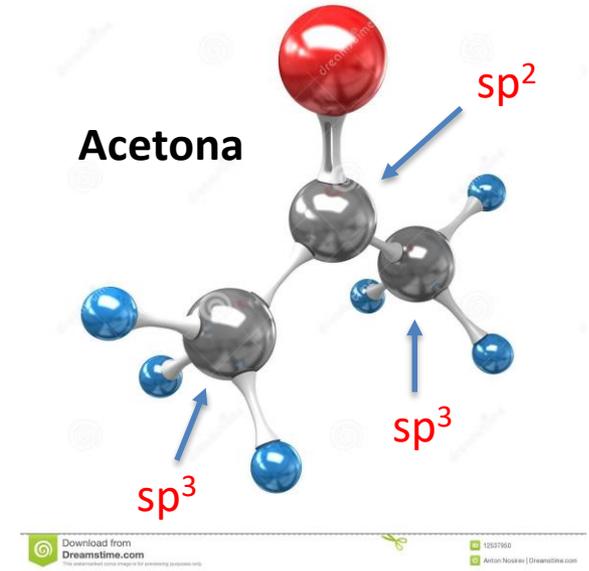
- i) siguiendo una forma tetraédrica, para lo que precisaremos una hibridación sp^3 de los orbitales de valencia del carbono. De esta forma, el carbono establece cuatro enlaces sencillos con átomos vecinos (tres si está cargado negativamente). Ej: hidrocarburos saturados, cloroformo, etanol, ...
- ii) siguiendo una forma triangular plana, para lo que precisaremos una hibridación sp^2 de los orbitales de valencia del carbono. De esta forma, el carbono establece dos enlaces sencillos y uno doble (tres sencillos si está cargado positivamente), completando así sus cuatro valencias (capacidades de combinación con otros átomos). Ej: etileno, acetona, formaldehído, ácido acético (donde un carbono es sp^3 y el otro sp^2), butadieno, ...
- iii) siguiendo una forma lineal, para lo que precisaremos una hibridación sp de los orbitales de valencia del carbono, de forma que el carbono establece un enlace sencillo y uno triple (ej: acetileno), o dos dobles enlaces consecutivos (dióxido de carbono, aleno).

El carbono

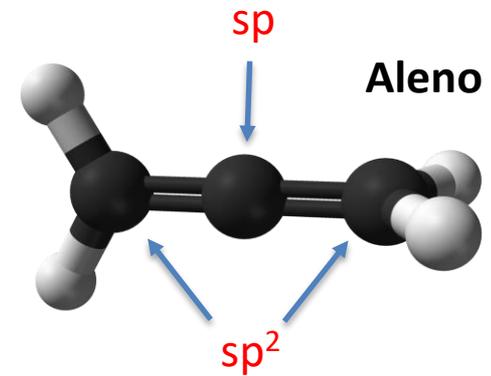
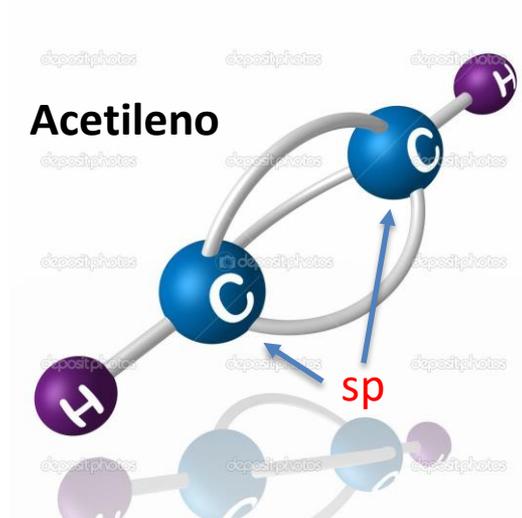
Tetraédrica



Triangular plana



Lineal



Grupos funcionales

Un grupo funcional es un átomo o grupos de átomos que posee unas características químicas similares, dotando de cierta homogeneidad a los compuestos en los que aparecen al dotarles de propiedades y reactividad química especiales.

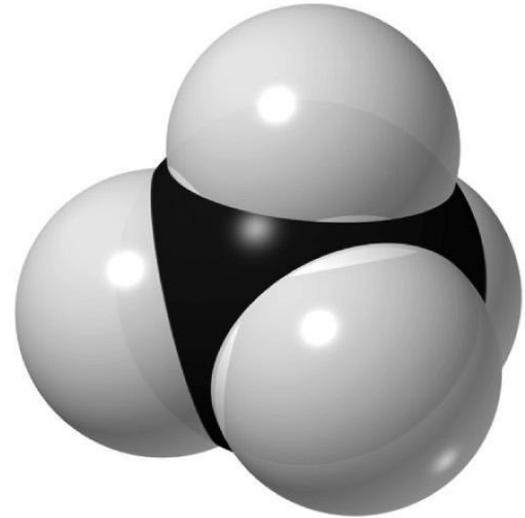
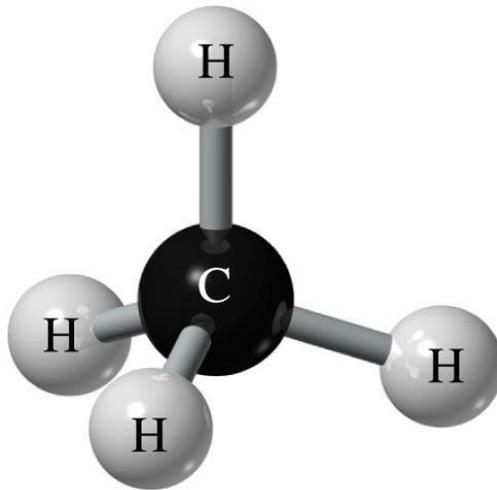
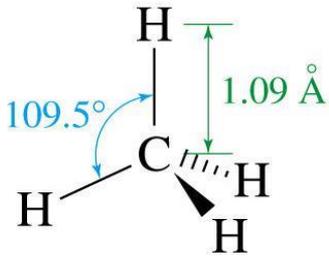
Un compuesto orgánico se nombra a partir de los grupos funcionales que posee, por lo que es muy importante su (re)conocimiento. Para ello, existe un orden de prelación para estos grupos.

Formula	Función	Sufijo si es grupo principal	Prefijo si es sustituyente (grupo secundario)	Ejemplo
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{R}-\text{C}-\text{OH} \end{array}$	Ácido	-oico	carboxi-	CH_3-COOH ácido etanoico
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{R}-\text{C}-\text{O}-\text{R}' \end{array}$	Éster	-oato de ... ilo	alcoxicarbonil-	$\text{CH}_3-\text{COO}-\text{CH}_3$ etanoato de metilo
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{R}-\text{C}-\text{NH}_2 \end{array}$	Amida	-amida	carbamoil-	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CONH}_2$ Propanamida
$\text{R}-\text{C}\equiv\text{N}$	Nitrilo	-nitrilo	ciano-	CH_3-CN Etanonitrilo Cianuro de metilo
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{R}-\text{C}-\text{H} \end{array}$	Aldehído	-al	oxo-	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CHO}$ Propanal
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{R}-\text{C}-\text{R}' \end{array}$	Cetona	-ona	oxo-	$\text{CH}_3-\text{CO}-\text{CH}_3$ Propanona
$\text{R}-\text{OH}$	Alcohol	-ol	hidroxi-	$\text{CH}_3-\text{CH}_2\text{OH}$ Etanol
$\text{R}-\text{NH}_2$	Amina	-amina	amino-	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{NH}_2$ Etilamina Etanamina
$\text{R}-\text{O}-\text{R}'$	Éter	-oxi ... ano -il ...ileter	oxa-	$\text{CH}_3-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ Metoxietano Etilmetiléter
$\text{C}=\text{C}$	Doble enlace	-eno		$\text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}_2$ Propeno
$-\text{C}\equiv\text{C}-$	Triple enlace	-ino		$\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{CH}$ Propino
$\text{R}-\text{NO}_2$	Nitro		nitro-	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{NO}_2$ Nitroetano
$\text{R}-\text{X}$	Halógeno		fluoro-, cloro-, bromo-, yodo-	$\text{CH}_3-\text{CH}_2\text{Br}$ Bromoetano
$-\text{R}$	Radical		-il	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_3 \end{array}$ Metilpropano

Estados de oxidación del carbono

Aunque en los compuestos inorgánicos el carbono presenta unos estados de oxidación concretos, en los compuestos orgánicos pueden ir desde +4 a -4 pasando por todos los estados de oxidación posibles, incluso actuando con números de oxidación positivos y negativos en el mismo compuesto, dependiendo con qué átomos esté enlazado. Veamos algunos ejemplos.

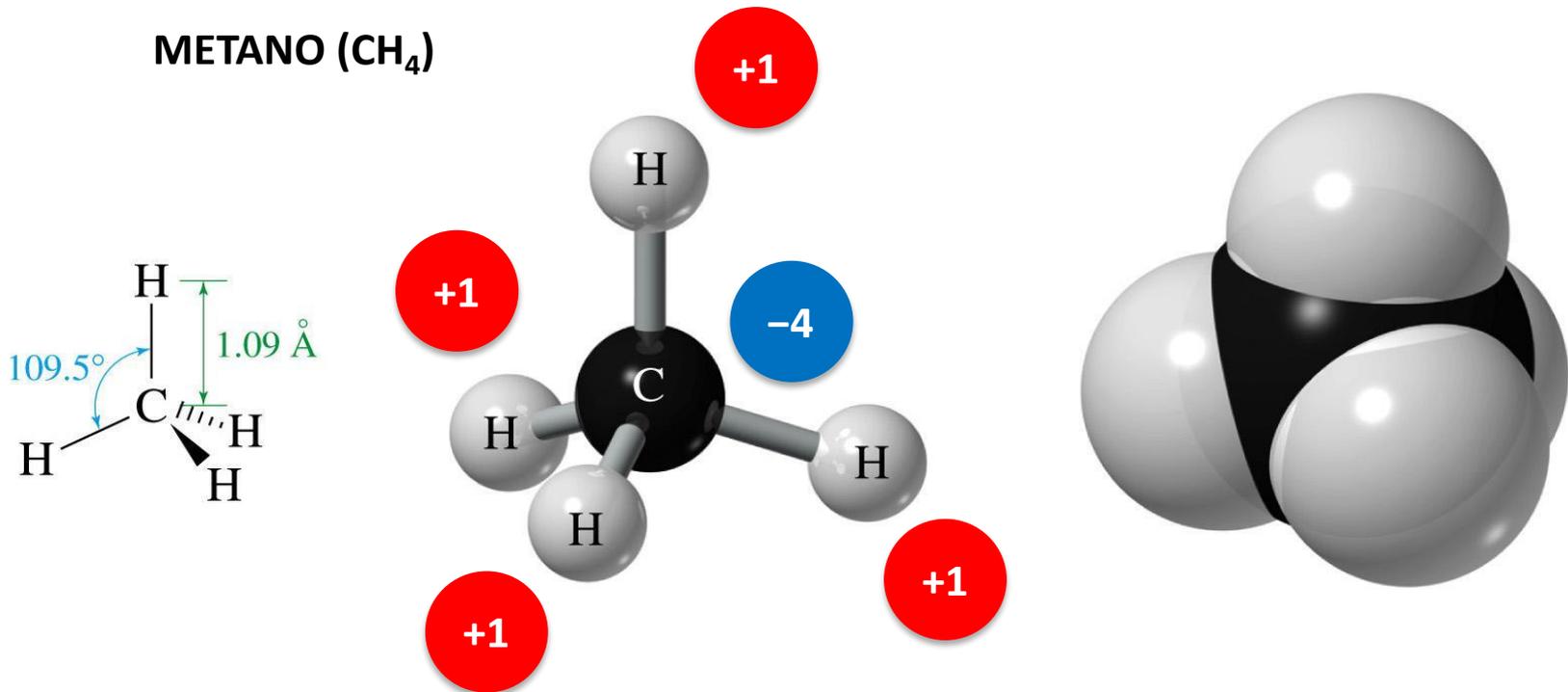
METANO (CH₄)



Estados de oxidación del carbono

Aunque en los compuestos inorgánicos el carbono presenta unos estados de oxidación concretos, en los compuestos orgánicos pueden ir desde +4 a -4 pasando por todos los estados de oxidación posibles, incluso actuando con números de oxidación positivos y negativos en el mismo compuesto, dependiendo con qué átomos esté enlazado. Veamos algunos ejemplos.

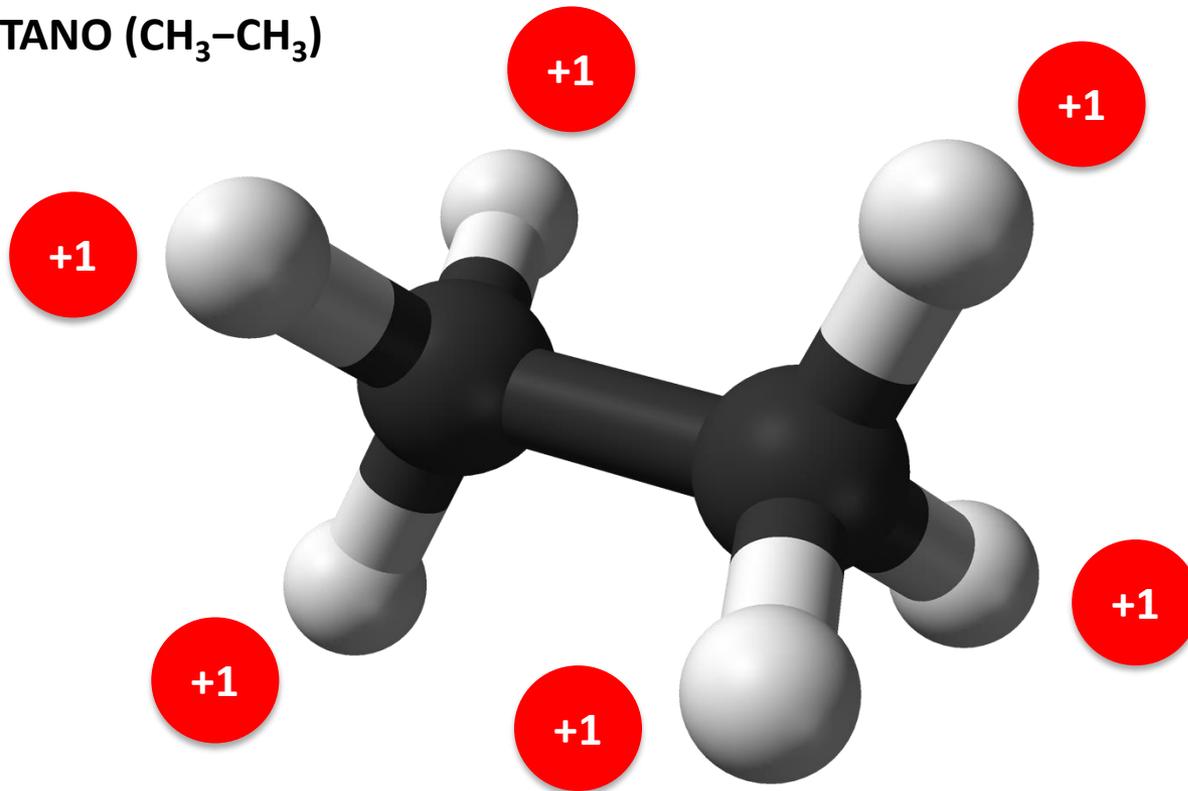
METANO (CH₄)



Estados de oxidación del carbono

Aunque en los compuestos inorgánicos el carbono presenta unos estados de oxidación concretos, en los compuestos orgánicos pueden ir desde +4 a -4 pasando por todos los estados de oxidación posibles, incluso actuando con números de oxidación positivos y negativos en el mismo compuesto, dependiendo con qué átomos esté enlazado. Veamos algunos ejemplos.

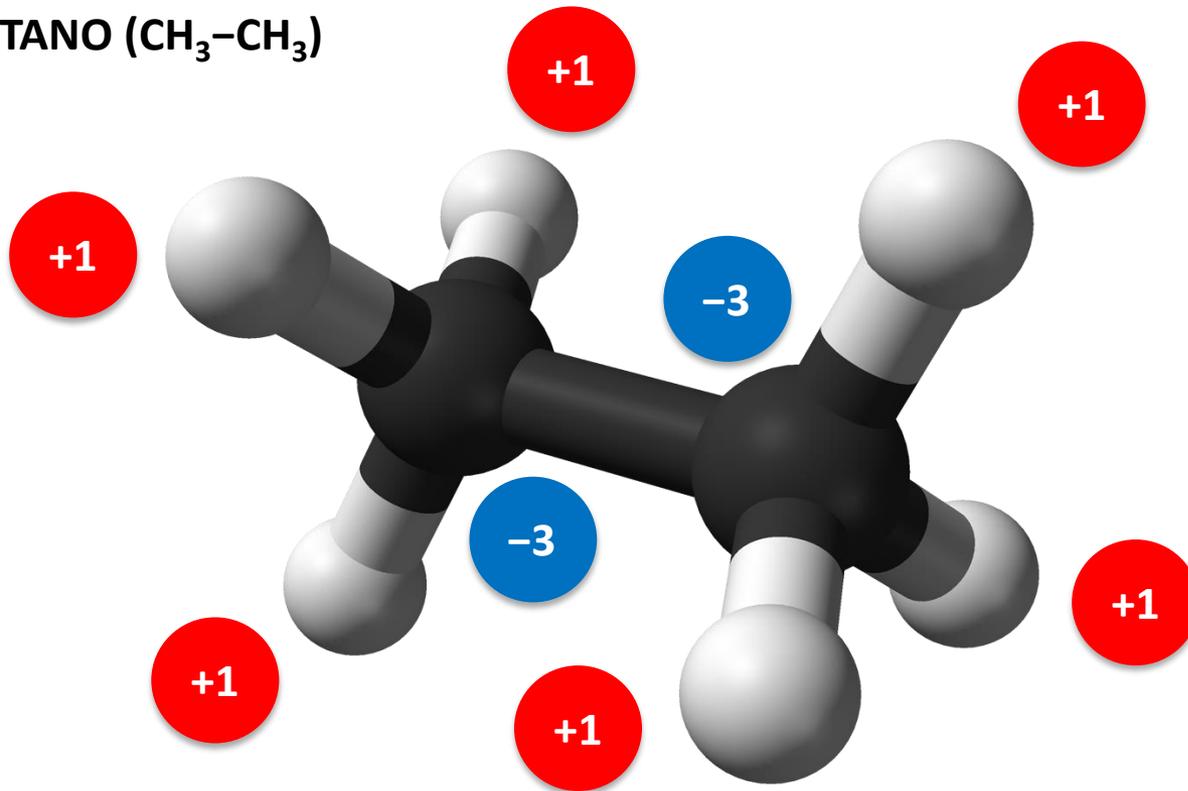
ETANO ($\text{CH}_3\text{-CH}_3$)



Estados de oxidación del carbono

Aunque en los compuestos inorgánicos el carbono presenta unos estados de oxidación concretos, en los compuestos orgánicos pueden ir desde +4 a -4 pasando por todos los estados de oxidación posibles, incluso actuando con números de oxidación positivos y negativos en el mismo compuesto, dependiendo con qué átomos esté enlazado. Veamos algunos ejemplos.

ETANO ($\text{CH}_3\text{-CH}_3$)



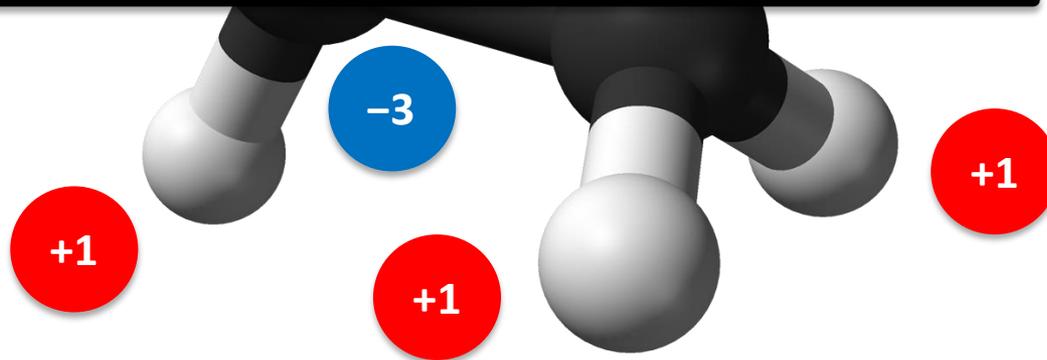
Estados de oxidación del carbono

Aunque en los compuestos inorgánicos el carbono presenta unos estados de oxidación concretos, en los compuestos orgánicos pueden ir desde +4 a -4 pasando por todos los estados de oxidación posibles, incluso actuando con números de oxidación positivos y negativos en el mismo compuesto, dependiendo con qué átomos esté enlazado. Veamos algunos ejemplos.

ETANO

+1

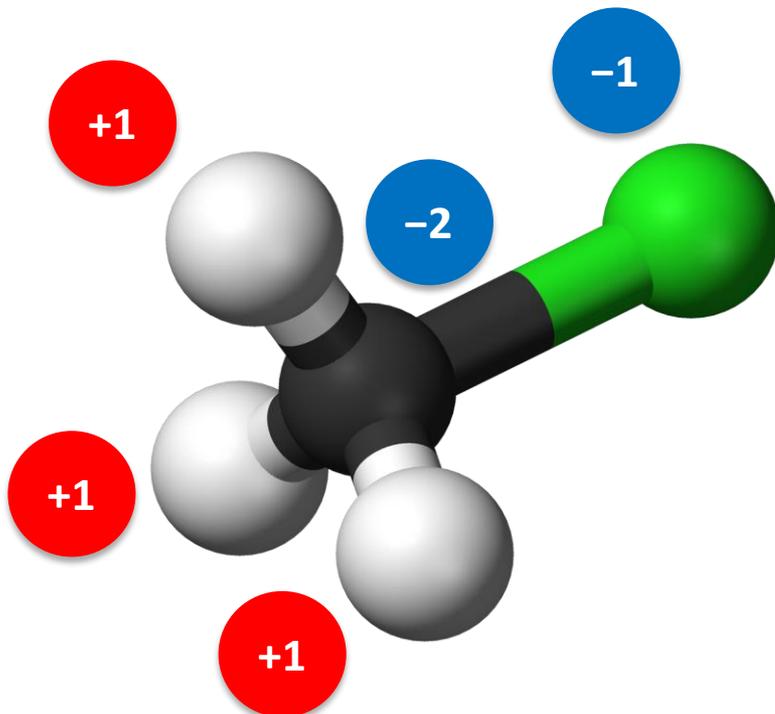
El carbono no modifica su número de oxidación al combinarse consigo mismo



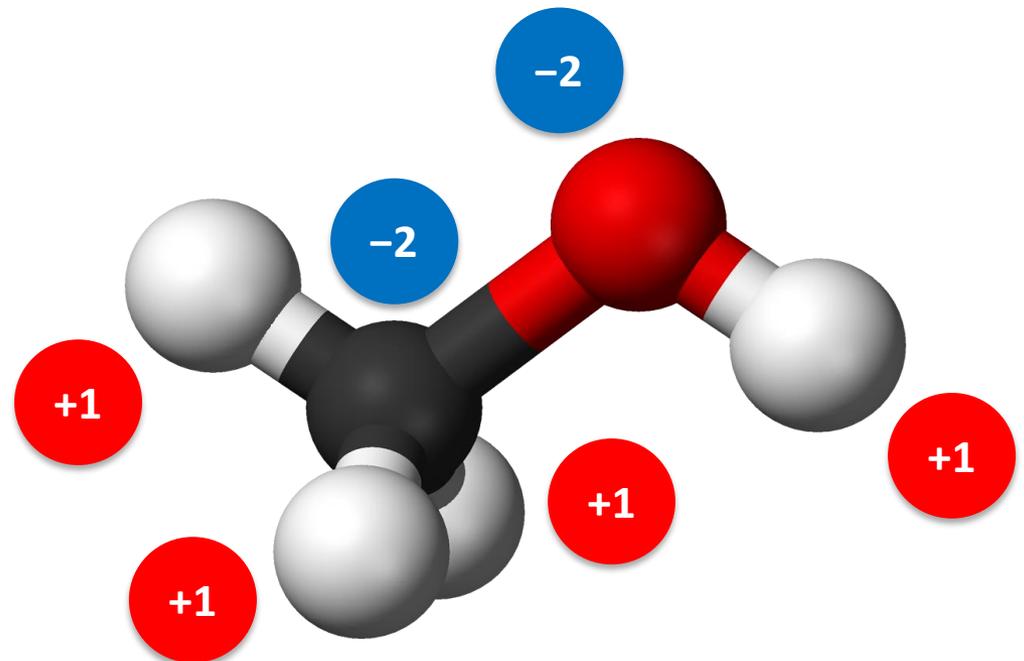
Estados de oxidación del carbono

Aunque en los compuestos inorgánicos el carbono presenta unos estados de oxidación concretos, en los compuestos orgánicos pueden ir desde +4 a -4 pasando por todos los estados de oxidación posibles, incluso actuando con números de oxidación positivos y negativos en el mismo compuesto, dependiendo con qué átomos esté enlazado. Veamos algunos ejemplos.

CLOROMETANO (CH_3Cl)



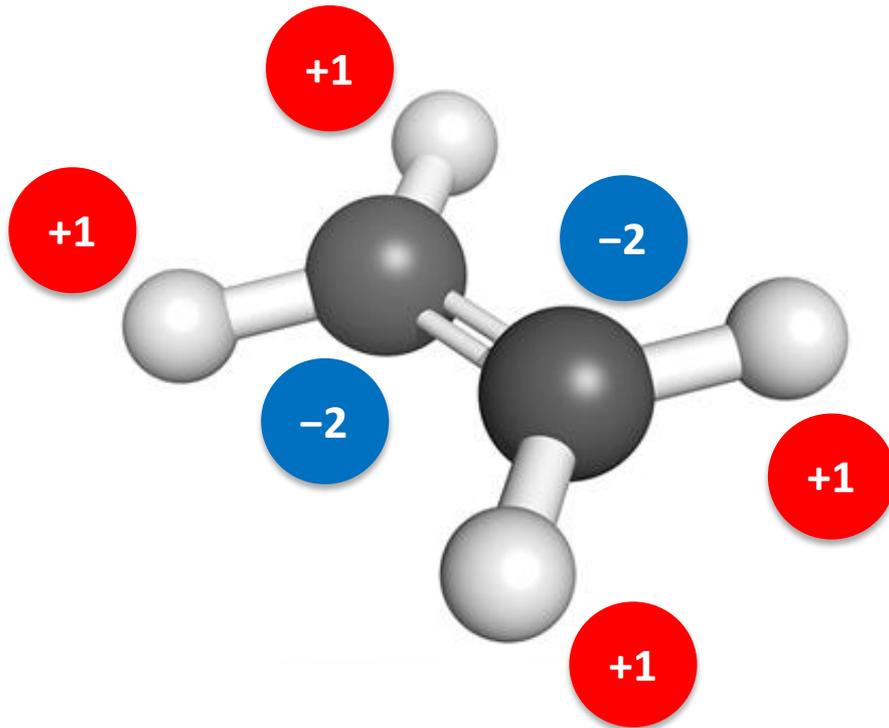
METANOL (CH_3OH)



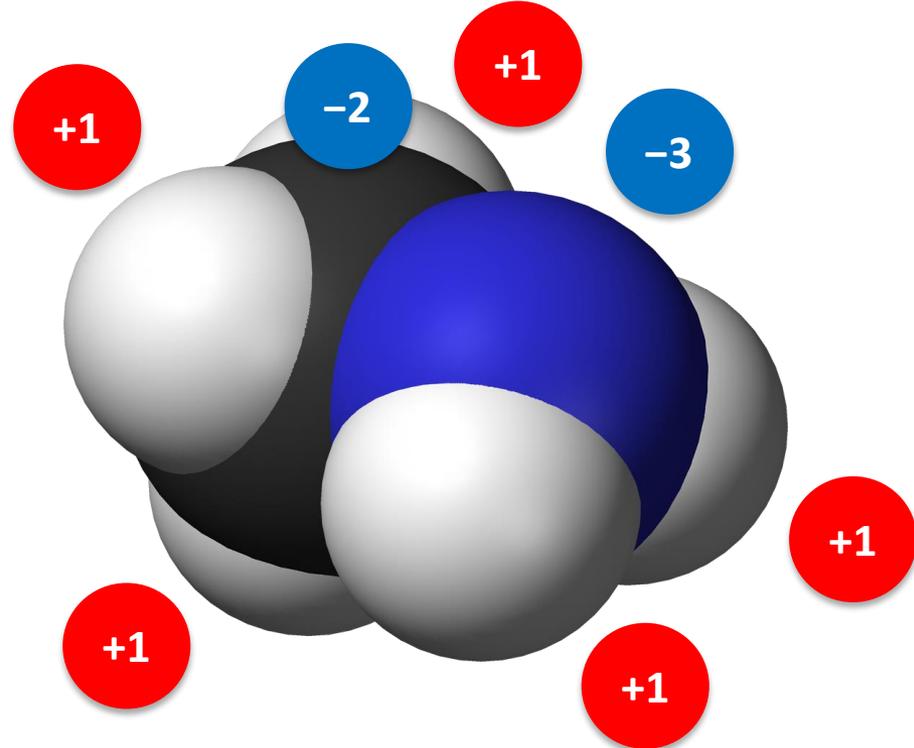
Estados de oxidación del carbono

Aunque en los compuestos inorgánicos el carbono presenta unos estados de oxidación concretos, en los compuestos orgánicos pueden ir desde +4 a -4 pasando por todos los estados de oxidación posibles, incluso actuando con números de oxidación positivos y negativos en el mismo compuesto, dependiendo con qué átomos esté enlazado. Veamos algunos ejemplos.

ETILENO ($\text{CH}_2=\text{CH}_2$)



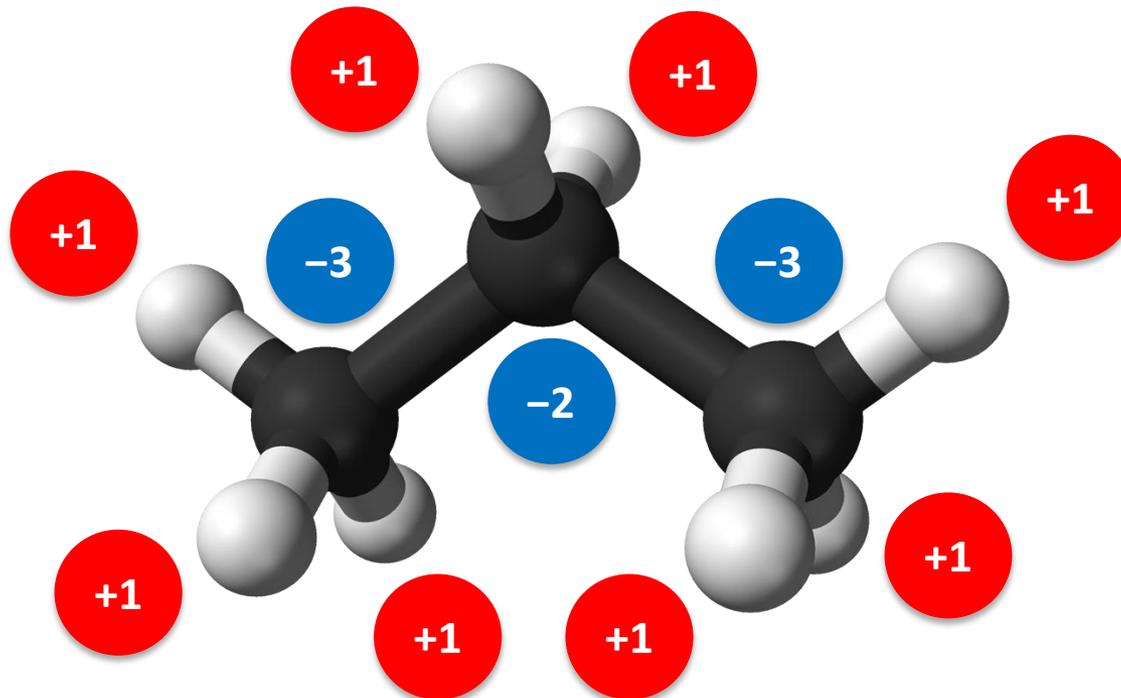
METILAMINA (CH_3NH_2)



Estados de oxidación del carbono

Aunque en los compuestos inorgánicos el carbono presenta unos estados de oxidación concretos, en los compuestos orgánicos pueden ir desde +4 a -4 pasando por todos los estados de oxidación posibles, incluso actuando con números de oxidación positivos y negativos en el mismo compuesto, dependiendo con qué átomos esté enlazado. Veamos algunos ejemplos.

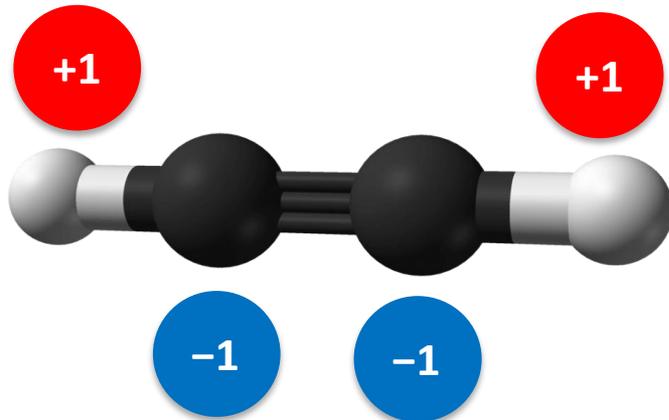
PROPANO ($\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_3$)



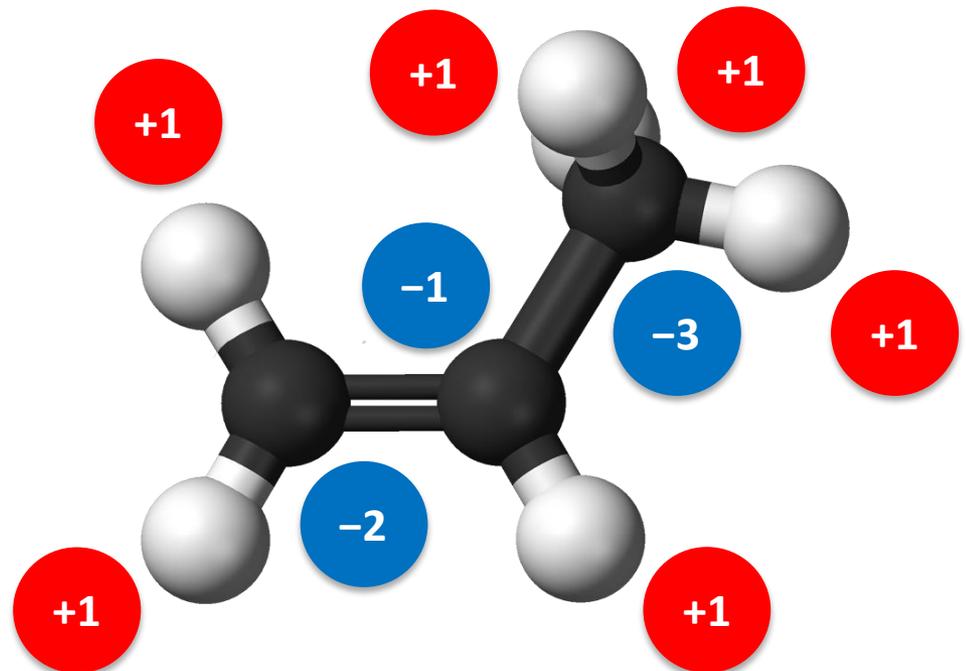
Estados de oxidación del carbono

Aunque en los compuestos inorgánicos el carbono presenta unos estados de oxidación concretos, en los compuestos orgánicos pueden ir desde +4 a -4 pasando por todos los estados de oxidación posibles, incluso actuando con números de oxidación positivos y negativos en el mismo compuesto, dependiendo con qué átomos esté enlazado. Veamos algunos ejemplos.

ACETILENO ($\text{CH}\equiv\text{CH}$)



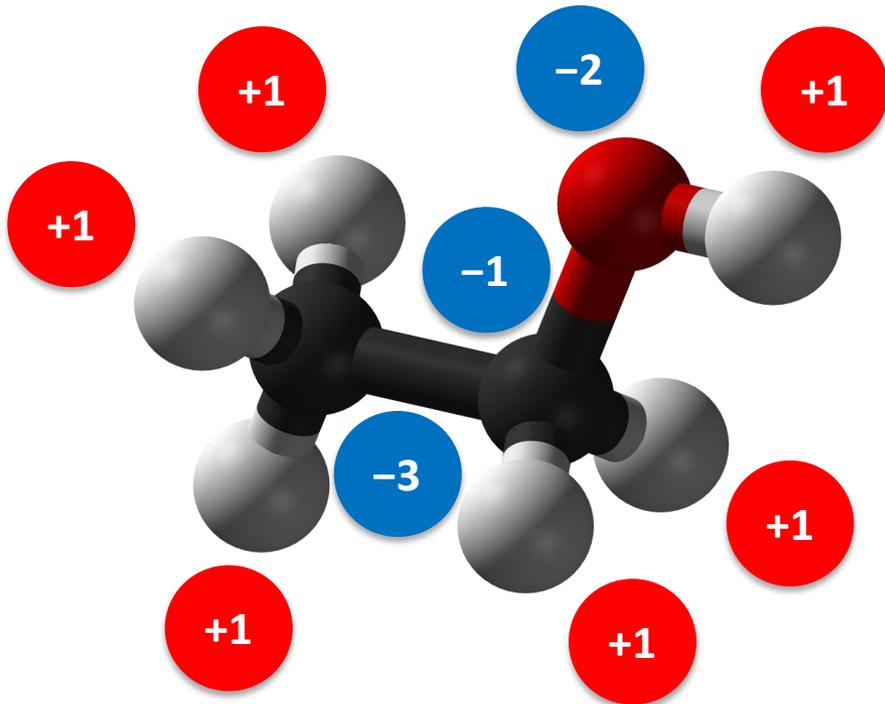
PROPENO ($\text{CH}_3\text{-CH}=\text{CH}_2$)



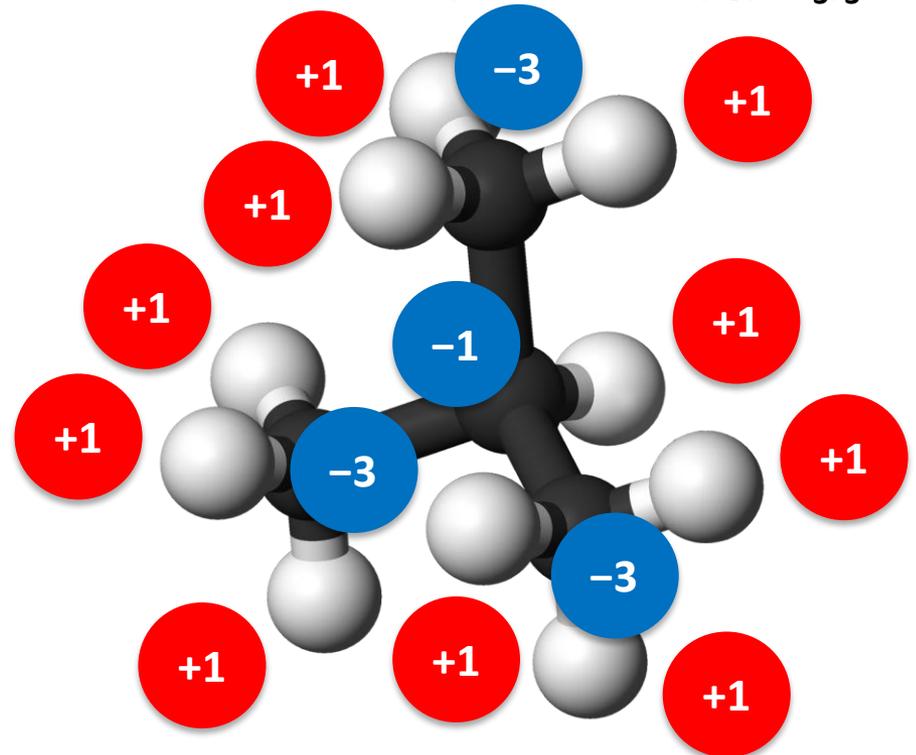
Estados de oxidación del carbono

Aunque en los compuestos inorgánicos el carbono presenta unos estados de oxidación concretos, en los compuestos orgánicos pueden ir desde +4 a -4 pasando por todos los estados de oxidación posibles, incluso actuando con números de oxidación positivos y negativos en el mismo compuesto, dependiendo con qué átomos esté enlazado. Veamos algunos ejemplos.

ETANOL ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$)



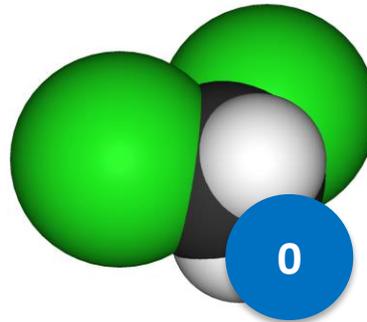
2-METILPROPANO (ISOBUTANO) [$(\text{CH}_3)_3\text{CH}$]



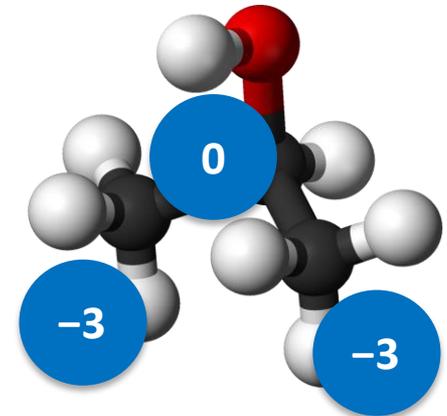
Estados de oxidación del carbono

Aunque en los compuestos inorgánicos el carbono presenta unos estados de oxidación concretos, en los compuestos orgánicos pueden ir desde +4 a -4 pasando por todos los estados de oxidación posibles, incluso actuando con números de oxidación positivos y negativos en el mismo compuesto, dependiendo con qué átomos esté enlazado. Veamos algunos ejemplos.

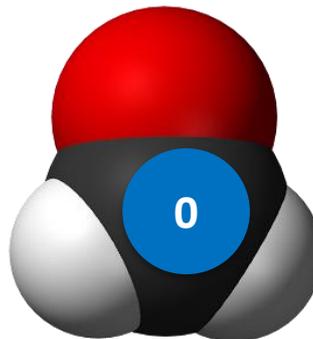
DICLOROMETANO (CH_2Cl_2)



2-PROPANOL (ISOPROPANOL) ($\text{CH}_3\text{CHOHCH}_3$)



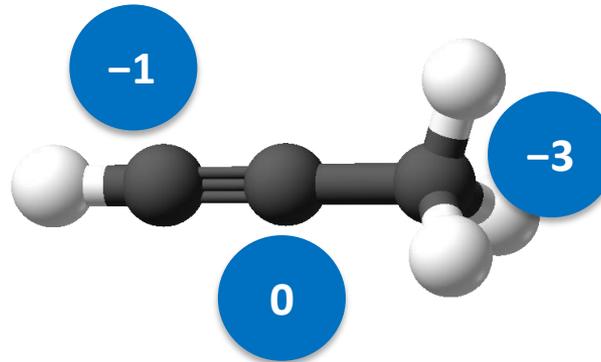
FORMALDEHÍDO (HCHO)



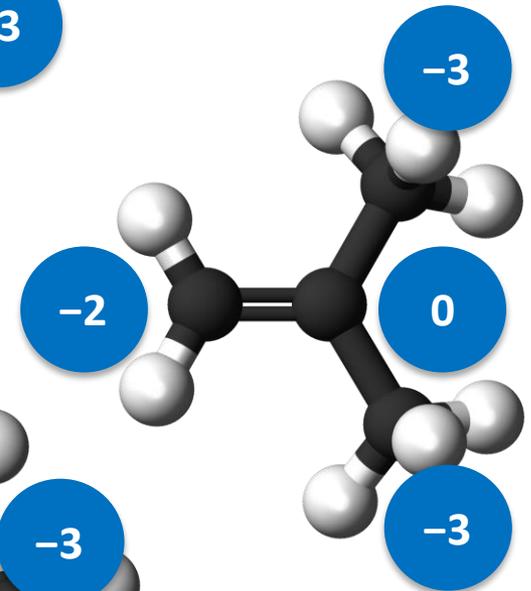
Estados de oxidación del carbono

Aunque en los compuestos inorgánicos el carbono presenta unos estados de oxidación concretos, en los compuestos orgánicos pueden ir desde +4 a -4 pasando por todos los estados de oxidación posibles, incluso actuando con números de oxidación positivos y negativos en el mismo compuesto, dependiendo con qué átomos esté enlazado. Veamos algunos ejemplos.

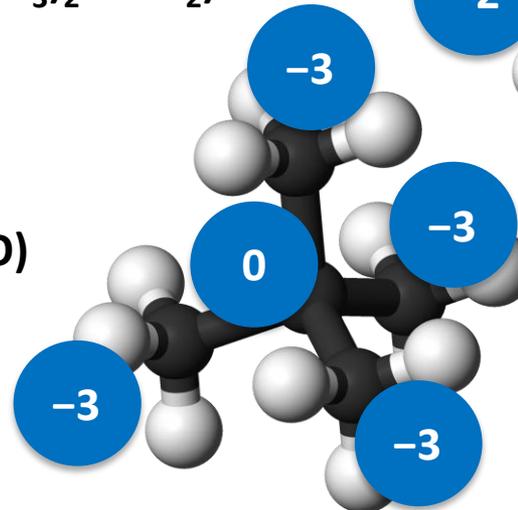
PROPINO ($\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CH}$)



2-METILPROPANO (ISOPROPENO) [$(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{CH}_2$]



2,2-DIMETILPROPANO (NEOPENTANO)

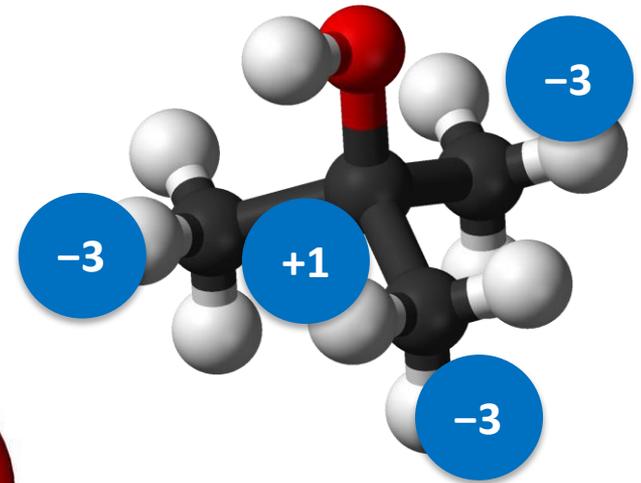


CARBONO ELEMENTAL

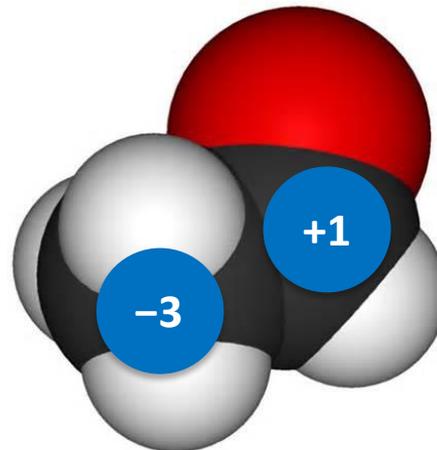
Estados de oxidación del carbono

Aunque en los compuestos inorgánicos el carbono presenta unos estados de oxidación concretos, en los compuestos orgánicos pueden ir desde +4 a -4 pasando por todos los estados de oxidación posibles, incluso actuando con números de oxidación positivos y negativos en el mismo compuesto, dependiendo con qué átomos esté enlazado. Veamos algunos ejemplos.

2-METIL-2-PROPANOL (*tert*-BUTANOL) [(CH₃)₃COH]



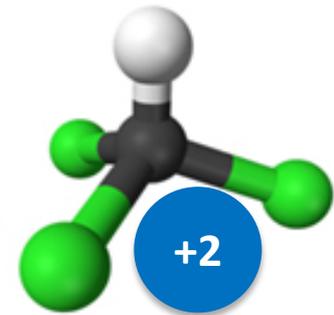
ACETALDEHÍDO (CH₃CHO)



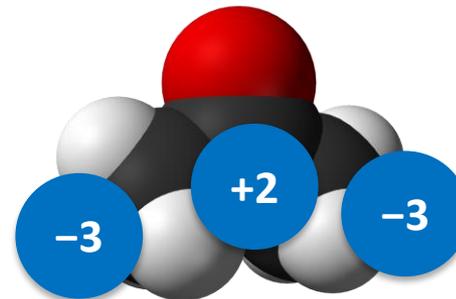
Estados de oxidación del carbono

Aunque en los compuestos inorgánicos el carbono presenta unos estados de oxidación concretos, en los compuestos orgánicos pueden ir desde +4 a -4 pasando por todos los estados de oxidación posibles, incluso actuando con números de oxidación positivos y negativos en el mismo compuesto, dependiendo con qué átomos esté enlazado. Veamos algunos ejemplos.

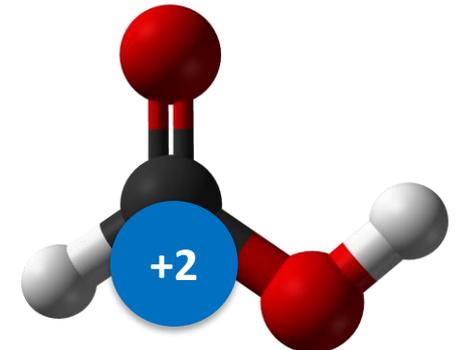
TRICLOROMETANO (CLOROFORMO) [CHCl_3]



PROPANONA (ACETONA) [$(\text{CH}_3)_2\text{CO}$]



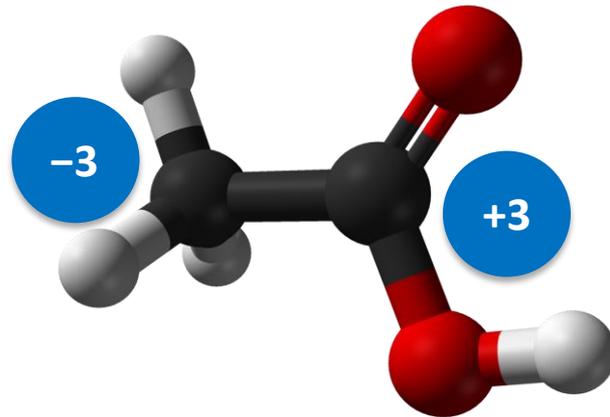
ÁCIDO FÓRMICO (HCOOH)



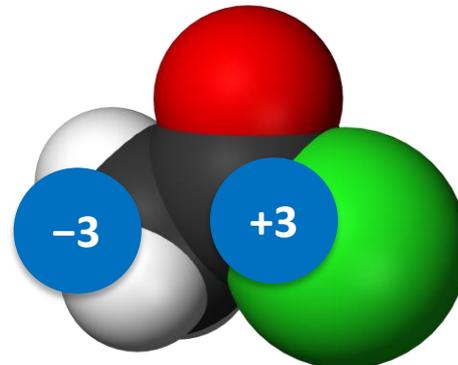
Estados de oxidación del carbono

Aunque en los compuestos inorgánicos el carbono presenta unos estados de oxidación concretos, en los compuestos orgánicos pueden ir desde +4 a -4 pasando por todos los estados de oxidación posibles, incluso actuando con números de oxidación positivos y negativos en el mismo compuesto, dependiendo con qué átomos esté enlazado. Veamos algunos ejemplos.

ÁCIDO ACÉTICO (CH_3COOH)



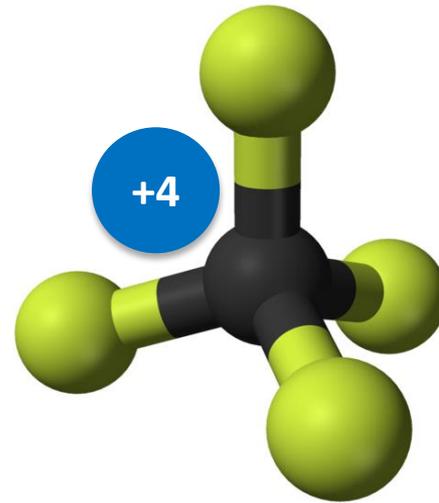
CLORURO DE ACETILO (CH_3COCl)



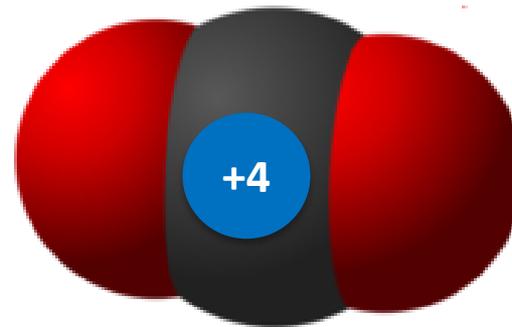
Estados de oxidación del carbono

Aunque en los compuestos inorgánicos el carbono presenta unos estados de oxidación concretos, en los compuestos orgánicos pueden ir desde +4 a -4 pasando por todos los estados de oxidación posibles, incluso actuando con números de oxidación positivos y negativos en el mismo compuesto, dependiendo con qué átomos esté enlazado. Veamos algunos ejemplos.

TETRACLORURO DE CARBONO (CCl_4)



DIÓXIDO DE CARBONO (CO_2)



Estados de oxidación del carbono

Aunque en los compuestos inorgánicos el carbono presenta unos estados de oxidación concretos, en los compuestos orgánicos pueden ir desde +4 a -4 pasando por todos los estados de oxidación posibles, incluso actuando con números de oxidación positivos y negativos en el mismo compuesto, dependiendo con qué átomos esté enlazado. Veamos algunos ejemplos.

Número de oxidación C		Primario	Secundario	Terciario	Cuaternario
-4	CH ₄				
-3		RCH ₃			
-2	CH ₃ OH CH ₃ X		R ¹ R ² CH ₂ R=CH ₂		
-1		RCH ₂ OH R≡CH		R ¹ R ² R ³ CH R ¹ =CHR ²	
0	CH ₂ O CH ₂ X ₂		R ¹ R ² CHOH R ¹ ≡CR ²		R ¹ R ² R ³ R ⁴ C R ¹ =CR ² R ³
+1		RCHO		R ¹ R ² R ³ COH	
+2	HCOOH CHX ₃		R ¹ R ² CO		
+3		RCOOH RCOX			
+4	CO ₂ CX ₄				

X: halógeno

Nucleofilia y electrofilia en química orgánica

Las especies nucleófilas son aquellas que disponen de pares de electrones libres (zonas con densidad de carga negativa) susceptibles de atacar zonas de una molécula con una densidad de carga positiva. Las aminas, los alcóxidos, haluros, amiduros y, en general, cualquier especie cargada negativamente actuará como buen nucleófilo.

Las especies electrófilas son aquellas que disponen de un déficit de carga. Las más típicas serán las cargas positivas, pero también lo son aquellos átomos de carbono unidos a átomos electronegativos o grupos electrón-atrayentes.

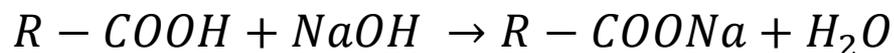
En ocasiones pueden solapar los conceptos de acidez/basicidad de Lewis y electrofilia/nucleofilia; sin embargo, mientras los primeros son conceptos termodinámicos, los segundos son más bien cinéticos.

Ejemplo: el metóxido (CH_3O^-) es una base más fuerte que el metanotiolato (CH_3S^-) ya que, en equilibrio, el primero da más OH^- al medio (presenta un valor mayor de K_b). Sin embargo, el metanotiolato en presencia de clorometano experimenta mucho más rápidamente la correspondiente reacción de sustitución mediante la eliminación de cloruros, por lo que podemos afirmar que este es más nucleófilo que el metóxido (reaccionará más rápidamente).

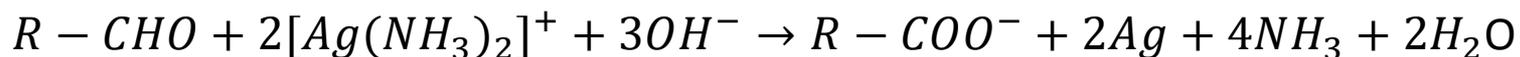
Algunas reacciones importantes

Aunque existen también reacciones ácido-base y típicas redox, quizá los tipos más importantes comprenden las reacciones de sustitución/eliminación por ataque nucleofílico o electrofílico.

Así pues, ya hemos visto que los ácidos acético y benzoico reaccionan, en agua, con una base fuerte (NaOH) para dar las correspondientes sales sódicas (acetato y benzoato).



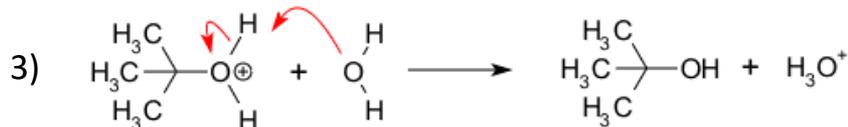
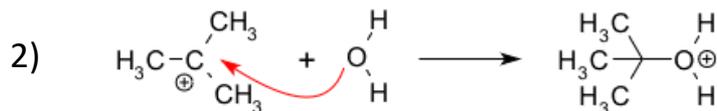
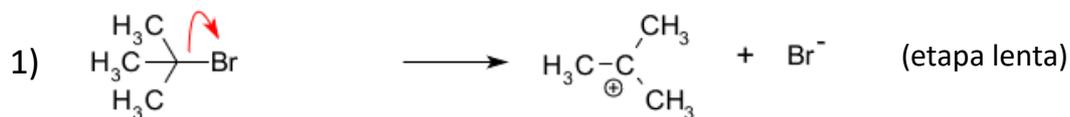
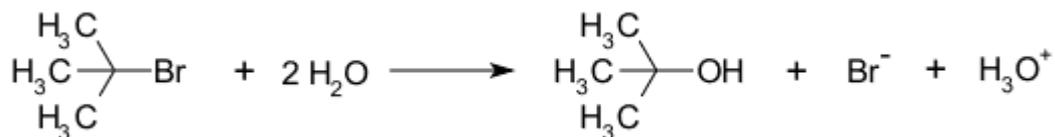
También, que la glucosa se oxida, en agua amoniacal, con $[Ag(NH_3)_2]^+$ para dar gluconato en la reacción del espejo de plata.



Algunas reacciones importantes

Sustitución nucleofílica. Los mecanismo más importantes son los llamados S_N1 , que depende de una única especie (mecanismo unimolecular) y S_N2 , mecanismo bimolecular.

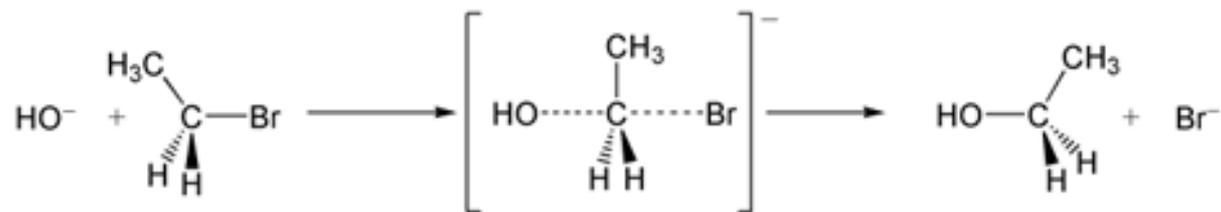
El mecanismo S_N1 es un mecanismo a través de un intermedio carbocatiónico. La etapa lenta es precisamente la formación del carbocatión, que es un proceso disociativo, por lo que no depende de la naturaleza del nucleófilo (solo depende de la concentración del carbocatión). Ejemplos de este mecanismo encontramos en la sustitución de haluros de alquilo secundarios y terciarios por agua para generar alcoholes.



Algunas reacciones importantes

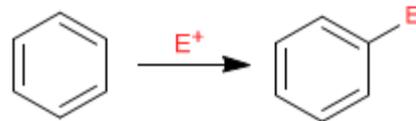
Sustitución nucleofílica. Los mecanismos más importantes son los llamados S_N1 , que depende de una única especie (mecanismo unimolecular) y S_N2 , mecanismo bimolecular.

El mecanismo S_N2 es un mecanismo en una sola etapa, donde el nucleófilo ataca al carbono por el lado opuesto al grupo saliente y lo sustituye, invirtiendo en este proceso el tetraedro definido por el carbono. La velocidad del proceso depende de la concentración de ambas especies. Ejemplo de este proceso es la sustitución de haluros primarios. Los buenos grupos salientes serán aquellos aniones voluminosos, muy polarizables, que soporten muy bien una carga negativa.

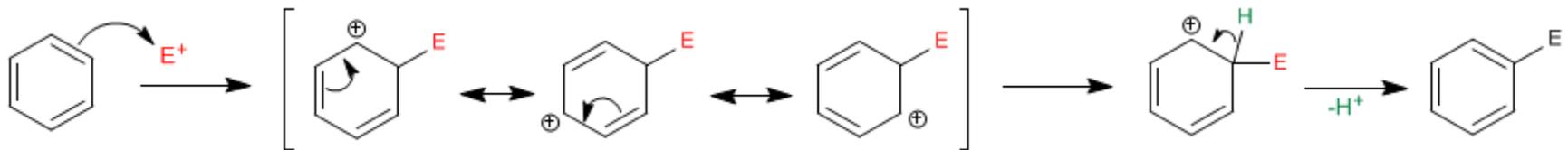


Algunas reacciones importantes

Sustitución electrofílica aromática (S_EAr). Dado que el benceno es un compuesto rico en electrones al poseer tres dobles enlaces conjugados, es fácil que se vea atacado por una especie electrófila del tipo E^+ . La carga positiva resultante se deslocaliza muy bien en el anillo y la reacción se completa eliminando un protón, de forma que el benceno recupera así la conjugación de los dobles enlaces.

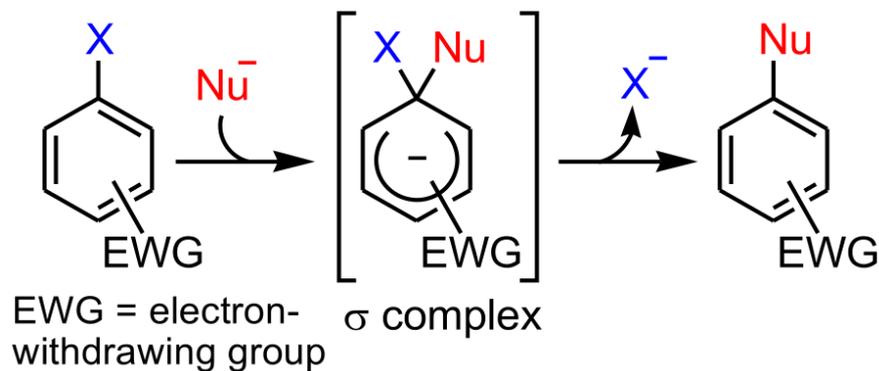


El mecanismo implicado en tales transformaciones puede resumirse de la siguiente manera.



Algunas reacciones importantes

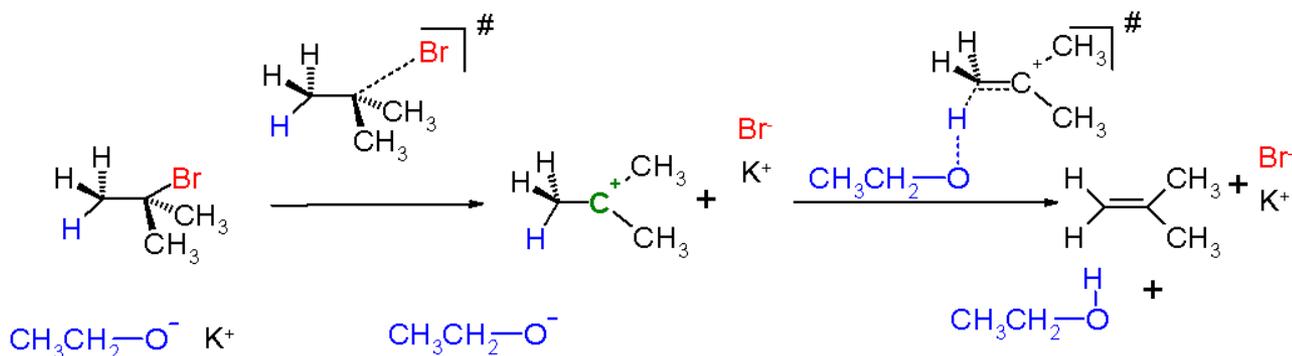
Sustitución nucleofílica aromática (S_NAr). En bencenos desactivados, como aquellos que tienen grupos fuertemente electroattractores o en el caso de la piridina, el anillo de benceno puede dar más fácilmente reacciones de sustitución nucleofílica, principalmente a través de un mecanismo de adición-eliminación, cuando hay presente un buen grupo saliente, como un haluro.



Algunas reacciones importantes

Reacciones de eliminación. Hay también dos mecanismos: E1 (para un proceso unimolecular) y E2 (para un proceso bimolecular). Las reacciones de eliminación más importantes son aquellas en las que los dos grupos que se eliminan están situados en átomos adyacentes, dando lugar a una insaturación en forma de alqueno, alquino o carbonilo.

La **eliminación unimolecular** o **E1** tiene lugar sobre derivados alquílicos secundarios o terciarios según un mecanismo de dos etapas. En la primera se produce la salida del grupo saliente para formar un carbocatión y a continuación la pérdida de un protón en posición β para formar un doble enlace.

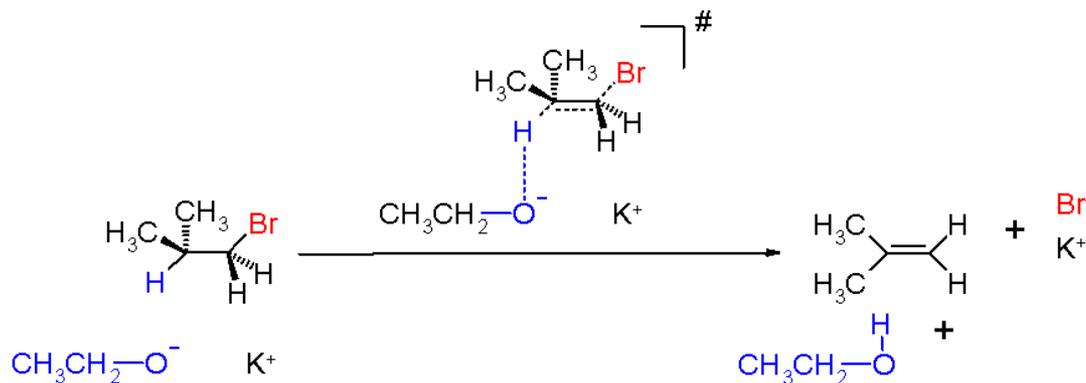


La presencia de la base (no nucleófila) favorece la eliminación frente a la sustitución.

Algunas reacciones importantes

Reacciones de eliminación. Hay también dos mecanismos: E1 (para un proceso unimolecular) y E2 (para un proceso bimolecular). Las reacciones de eliminación más importantes son aquellas en las que los dos grupos que se eliminan están situados en átomos adyacentes, dando lugar a una insaturación en forma de alqueno, alquino o carbonilo.

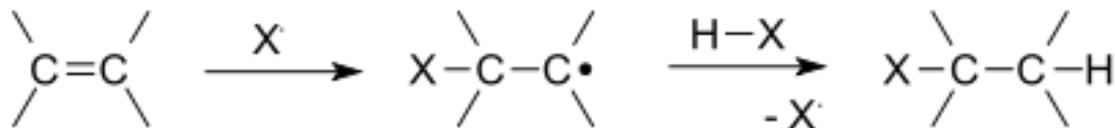
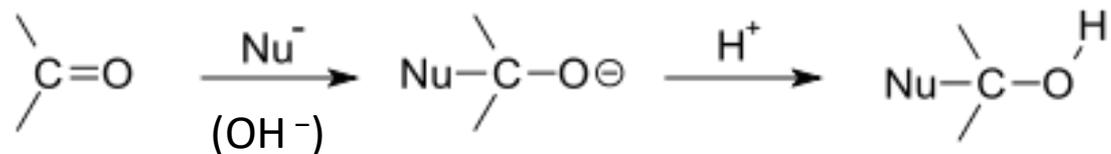
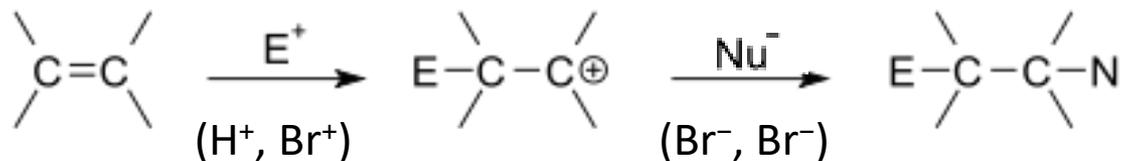
La **eliminación bimolecular** o **E2** consiste en un mecanismo concertado de abstracción de un protón por parte de una base fuerte y la salida simultánea de un grupo saliente situado en β , en el carbono contiguo, formándose una insaturación (doble enlace).



La impedimento estérico de la base (bases voluminosas) no nucleófila favorece la eliminación frente a la sustitución.

Algunas reacciones importantes

Reacciones de adición. En este caso, dos especies químicas se adicionan sobre las dos posiciones adyacentes que conforman un enlace múltiple. El proceso contrario es una reacción de eliminación. Podemos distinguir entre adición electrófila, nucleófila y radicalaria.



De Dissolution - Trabajo propio, CC BY-SA 3.0,
<https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=8859158>