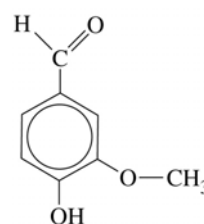




## Estructura de las moléculas orgánicas

Francisco García Calvo-Flores



## Contenidos

- 11-1 Moléculas orgánicas
- 11-2 Hibridación
- 11-3 Representación de las moléculas orgánicas
- 11-4 Conformaciones
- 11-5 Grupos funcionales
- 11-6 Formulación de los compuestos orgánicos

## Moléculas orgánicas

- La Química Orgánica es la química de los compuestos del carbono
- El carbono es el compuesto que sustenta la química de los seres vivos
- Existen millones de compuestos orgánicos tanto de origen natural como de síntesis
- 

F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos

Slide 3 of 75

## Propiedades

- Moléculas covalentes
- Puntos de fusión y ebullición bajos con respecto a sustancias iónicas
- Solubles en disolventes apolares
- Poco solubles en disolventes polares



F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos

Slide 4 of 75

## Compuestos del carbono

- Es un hecho comprobado la tetravalencia del carbono
- El carbono se une a sí mismo formando cadenas o ciclos mediante enlaces sencillos C-C, C=C ó C≡C
- Otros elementos como hidrógeno, oxígeno, nitrógeno, halógenos, fósforo etc, suelen formar parte de las estructuras orgánicas
- El origen de esta diversidad hay que encontrarlo en la configuración electrónica del C

F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

Slide 5 of 75

## Compuestos del carbono

- El carbono puede formar enlaces consigo mismo (cadenas y ciclos)
  - Sencillos C-C
  - Dobles C=C
  - Triples C≡C
- Cadenas y ciclos
- Con otros elementos
  - H, O, N, X, Metales ....

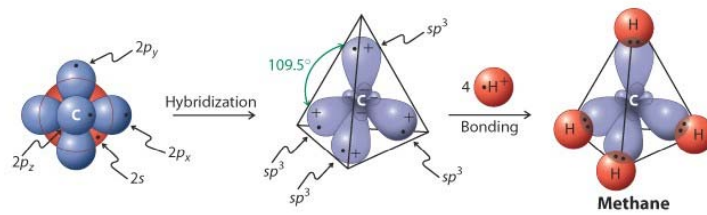
F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

Slide 6 of 75

## Hibridación

- Con hibridación  $sp^3$ 
  - C-C, C-H, C-X, C-O, C-S, C-N



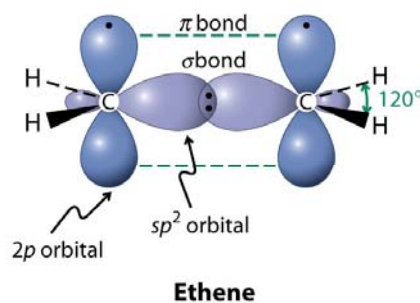
F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos

Slide 7 of 75

## Hibridación

- Con hibridación  $sp^2$ 
  - C=C, C=O, C=N, C=S



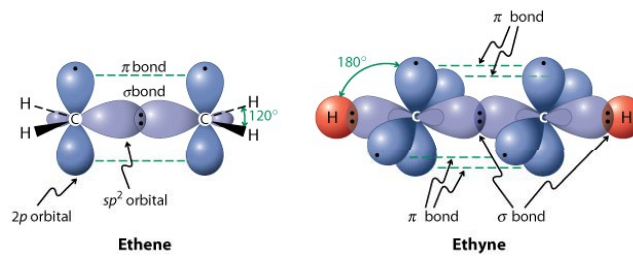
F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos

Slide 8 of 75

## Hibridación

### ■ Con hibridación $sp$



F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

Slide 9 of 75

## Representación de las moléculas orgánicas

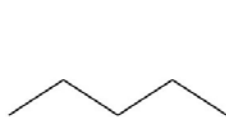
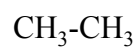
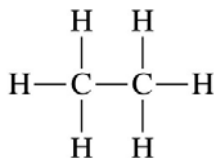
- Fórmula empírica:
  - Relación numérica de átomos de una molécula
  - ej: etano  $CH_3$
- Fórmula molecular:
  - Número de átomos de cada molécula
  - ej:  $C_2H_6$
- Fórmula estructural:
  - Se indica la disposición de los átomos en cada molécula.
  - Puede ser de dos tipos:
    - Desarrollada
    - Semidesarrollada
    - Simplificada
- a) Se dibujan todos los enlaces
- b) Todos los hidrógenos se escriben detrás del átomo de carbono al que van unidos
- c) Simplificada se representan cadenas y ciclos con líneas

F. G. Calvo-Flores

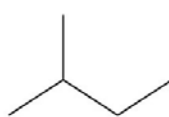
Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

Slide 10 of 75

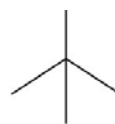
## Representación moléculas orgánicas



(1)

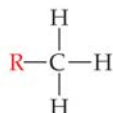


(2)

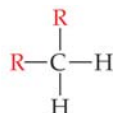


(3)

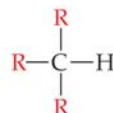
C primario



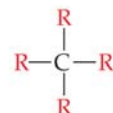
C. Secundario



C terciario



C Cuaternario



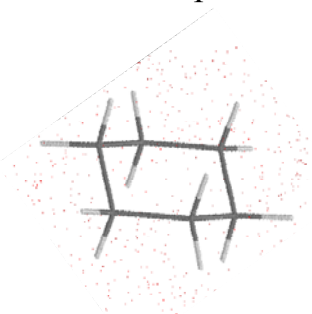
F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos

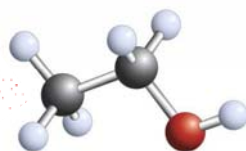
Slide 11 of 75

## Modelos

- Varillas
- Bolas
- Compactos



F. G. Calvo-Flores

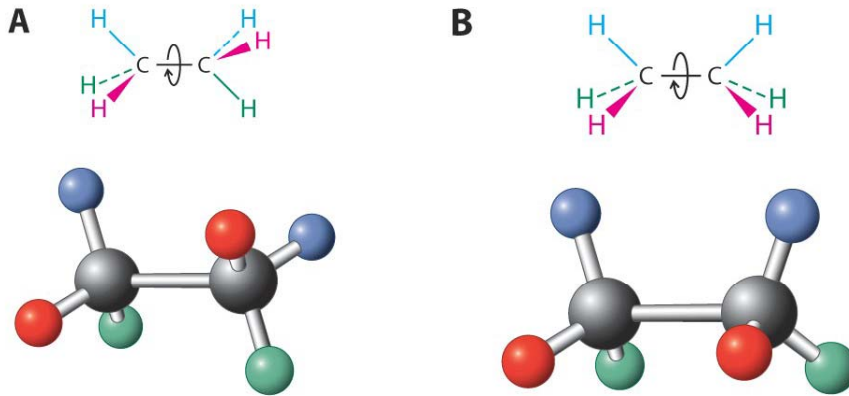


Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos



Slide 12 of 75

## Conformaciones

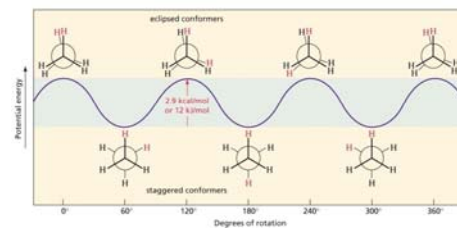
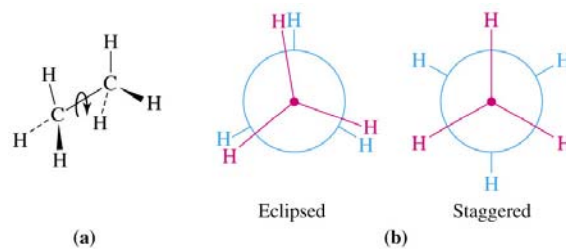


F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

Slide 13 of 75

## Conformaciones

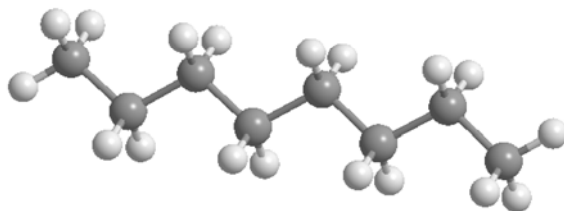


F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

Slide 14 of 75

## Conformaciones

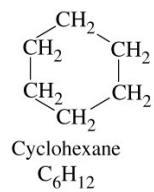
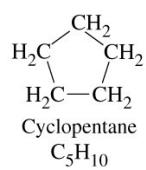
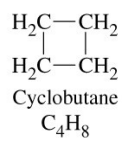
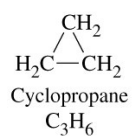


F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

Slide 15 of 75

## Conformaciones en ciclos



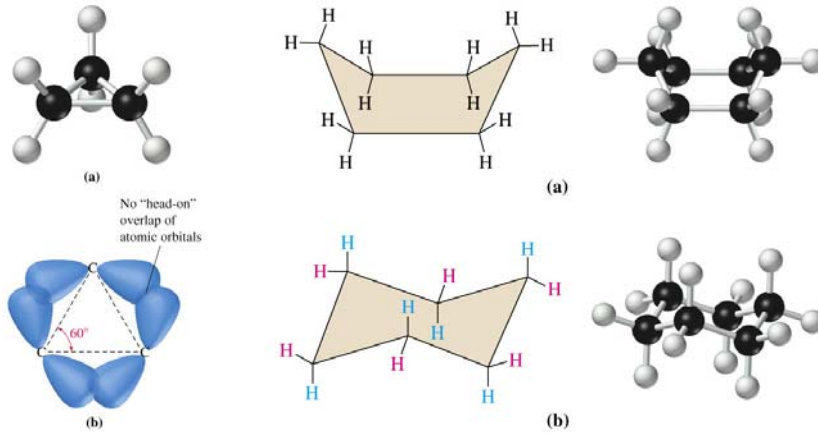
F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

Slide 16 of 75



## Conformaciones en ciclos

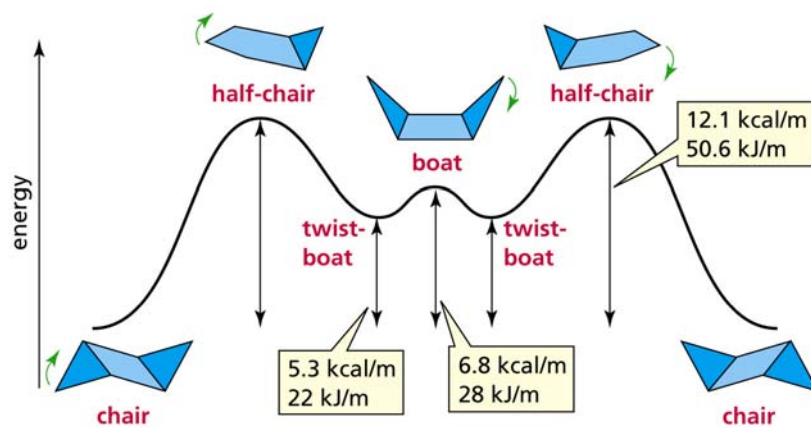


F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos

Slide 17 of 75

## Ciclohexano



F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos

Slide 18 of 75

## Grupos funcionales

### Grupos funcionales y series homólogas

- Grupo funcional:
- Agrupación de átomos que confieren a una molécula unas propiedades características
- ejemplos
  - -OH alcoholes
  - -COOH ácidos
- Serie homóloga:
  - Compuestos con un mismo grupo funcional que difieren en un  $-\text{CH}_2-$

## Grupos funcionales

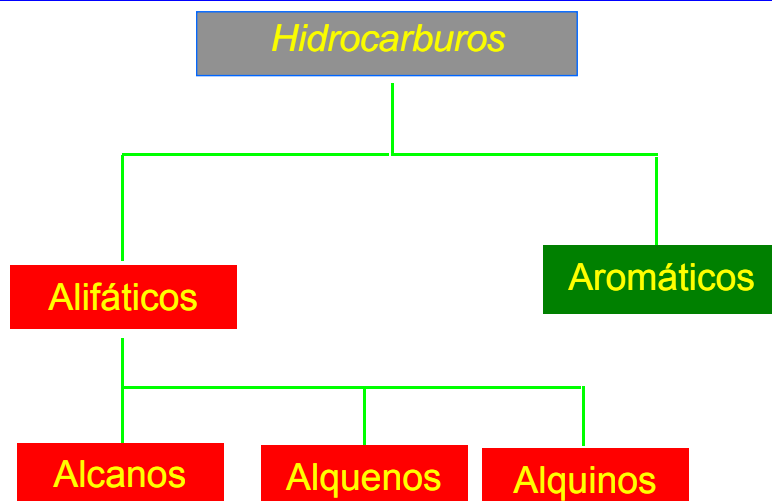
- Hidrocarburos
- Funciones oxigenadas
- Funciones nitrogenadas y azufradas
- Compuestos polifuncionales

F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

Slide 21 of 75

## Hidrocarburos



F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

Slide 22 of 75

## Alcanos

- Están constituidos por cadenas de átomos de carbono, con sus respectivos hidrógenos, unidos a través de enlaces sencillos.
- Se nombran con el prefijo indicador del número de carbonos seguido de la terminación -ano

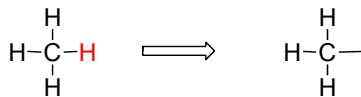
Nº de Carbonos	Nombre	Nº de Carbonos	Nombre
1	metano	7	heptano
2	etano	8	octano
3	propano	9	nonano
4	butano	10	decano
5	pentano	11	undecano
6	hexano	12	dodecano

F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

Slide 23 of 75

## Grupos



- Los grupos derivados de los alcanos se nombran sustituyendo la terminación **-ano** por **-ilo**
- Los grupos se numeran a partir del carbono unido a la cadena principal que se toma como carbono 1
- Se mantienen algunos nombres de grupos no sistemáticos

F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

Slide 24 of 75

## Grupos comunes

	Formula
• Metilo	$-\text{CH}_3$
• Etilo	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
• Propilo	$-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
• Isoproilo	$\text{CH}_3\text{CHCH}_3$
• Butilo	$-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
• Isobutilo	$-\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_3$
• <i>s</i> -butilo	$\text{CH}_3\text{CHCH}_2\text{CH}_3$
• <i>t</i> -butilo	$\text{CH}_3\text{C}(\text{CH}_3)_2$

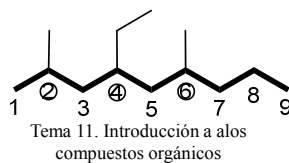
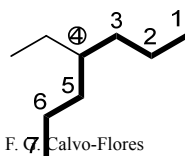
F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos

Slide 25 of 75

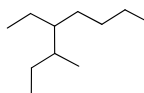
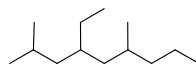
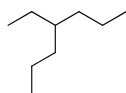
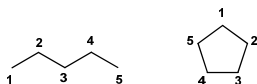
## Alcanos ramificados

- Localizadores
  - Numeración arábica
  - Combinación de localizadores más baja
- Prefijos multiplicadores
  - di-, tri-, tetra-
- Orden alfabético



1,2-dimetilciclopropano

## Ejemplos alcanos y cicloalcanos



F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

27

## Alquenos

- Son hidrocarburos que contienen al menos un doble enlace C=C.
- Se nombran cambiando la terminación **-ano** del alcano o del cicloalcano con igual número de átomos de carbono por **-eno**
- El primer término de la serie (eteno), también se denomina etileno
- Cuando hay más de un doble enlace se usa el correspondiente prefijo multiplicador di, tri, tetra...

F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

Slide 28 of 75

## Alquinos

- Presentan al menos un triple enlace  $C\equiv C$ .
- Se nombran con el prefijo del hidrocarburo con el número de átomos de carbono terminado en -ino
- El primer término de la serie (etino) presenta el nombre no sistemático de acetileno
- Los grupos derivados de los alquinos se nombran como el hidrocarburo de igual número de átomos de carbono terminado en -inilo
- Ej:  $CH_3CH_2C\equiv C$ - 1-butinilo

F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos

Slide 29 of 75

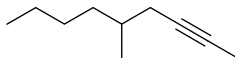
## Ejemplos Alquenos y alquinos



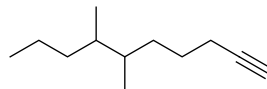
4-metiloct-2-eno



3-metilciclopent-1-eno



5-metilnon-2-ino



6,7-dimetildec-1-ino

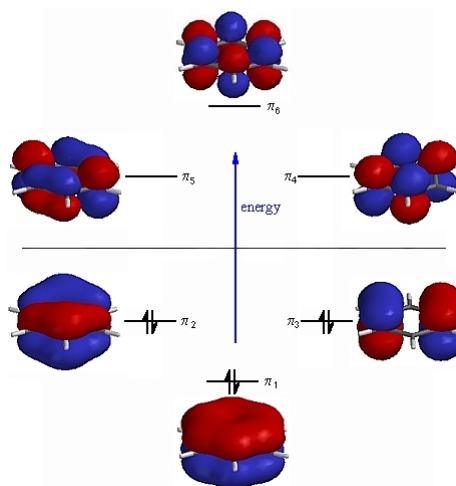
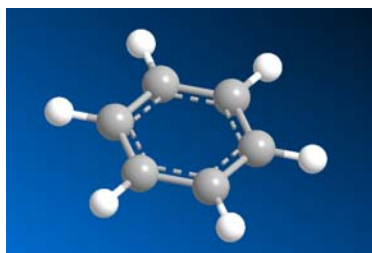
F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos

30

## Arenos

Benceno  $C_6H_6$

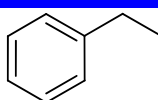


F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos

31

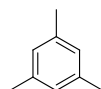
## Derivados del benceno



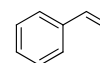
metilbenceno (tolueno)



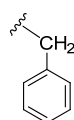
1,2-dimetilbenceno (o-xileno)



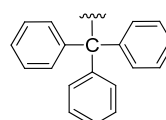
1,3,5-trimetilbenceno (mesitileno)



etenilbenceno (estireno)



bencilo



tritilo

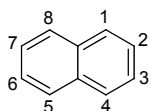
F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos

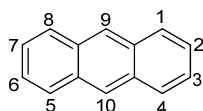
32



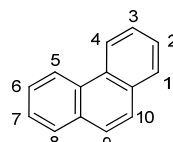
## Compuestos aromáticos polinucleares (PAN's)



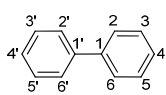
naftaleno



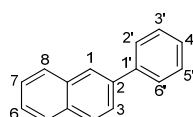
antraceno



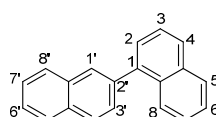
fenantreno



bifenilo



2-fenilnaftaleno



1,2'-binaftilo

F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos

33

## Derivados halogenados

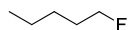
- Haluros de alquilo
- Haluros de arilo
- Haluros de vinilo

F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos

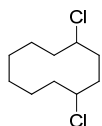
34

## Haluros de alquilo R-X



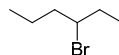
1-fluoropentano

fluoruro de pentilo



1,4-diclorociclodecano

1,4-dicloruro de ciclodecilo



3-bromohexano

3-bromuro de hexilo



1-yodociclohexano

yoduro de ciclohexilo

## Haluros de arilo

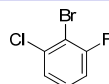


clorobenceno

F. G. Calvo-Flores

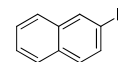


1-yodo-3-metilbenceno



2-bromo-1-cloro-3-fluorobenceno

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos



2-fluoronaftaleno

35

## Compuestos oxigenados

- Alcoholes
- Éteres y epóxidos
- Aldehídos
- Cetonas
- Ácidos carboxílicos
- Haluros de ácido
- Esteres
- Anhídridos

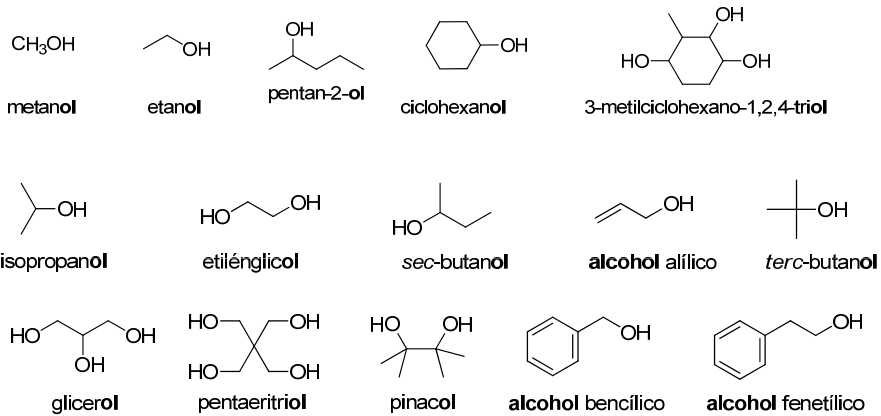
F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

36

## Alcoholes (-OH)

• -ol

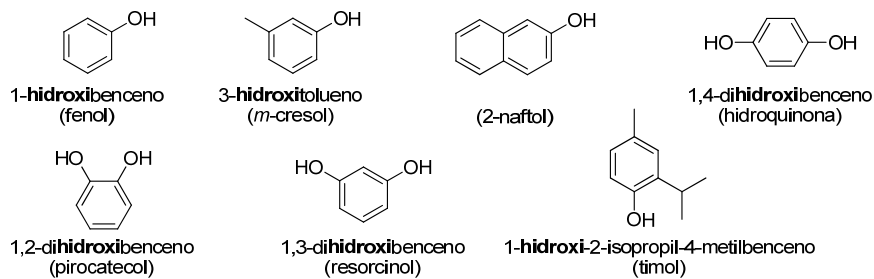


F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

37

## Fenoles (Ar-OH)



F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

38

## Grupos derivados de alcoholes



metoxi  
(MeO<sup>-</sup>)



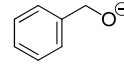
etoxi  
(EtO<sup>-</sup>)



propoxi  
(PrO<sup>-</sup>)

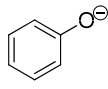


terc-butoxi  
(terc-BuO<sup>-</sup>)

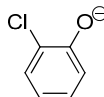


benziloxi  
(BzO<sup>-</sup>)

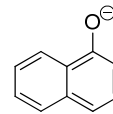
## Grupos derivados de fenoles



fenoxi



2-clorofenoxi



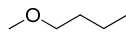
1-naftiloxi

F. G. Calvo-Flores

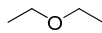
Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

39

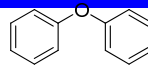
## Éteres (-O-) y epóxidos



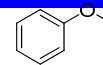
butil metil éter



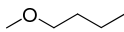
dimetil éter



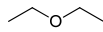
difenil éter



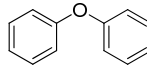
fenil metil éter  
(anisol)



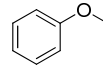
metoxibutano



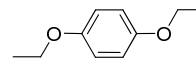
etoxietano



fenoxibenceno



metoxibenceno  
(anisol)



1,4-dietoxibenceno



oxetano



tetrahidrofurano



tetrahidropirano



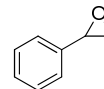
1,4-dioxano



oxirano  
(óxido de etileno)  
F. G. Calvo-Flores



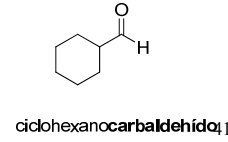
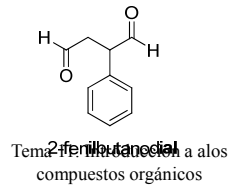
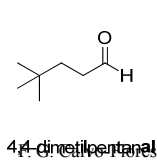
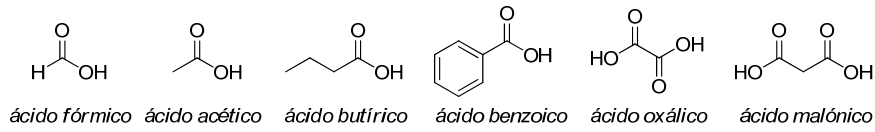
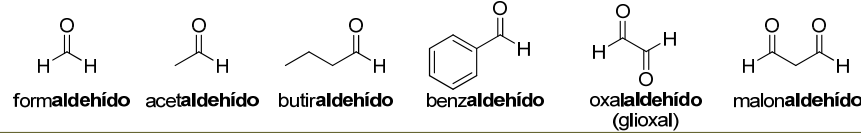
2-metil-2,3-epoxibutano  
Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos



1-fenil-1,2-epoxietano<sub>40</sub>

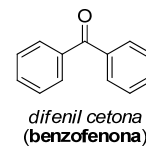
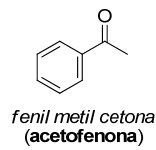
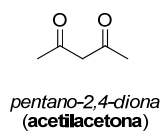
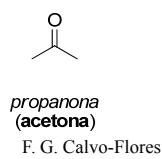
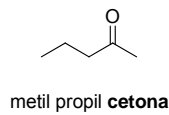
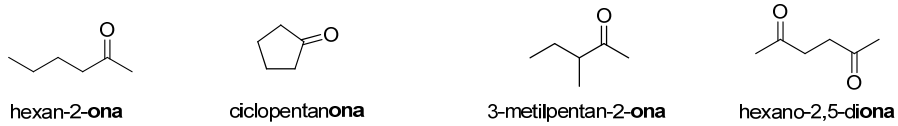
## Aldehídos (-CHO)

• -al



## Cetonas (-CO-)

• -ona

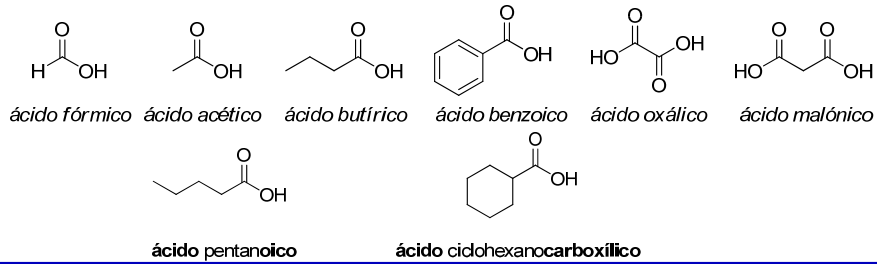


Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos

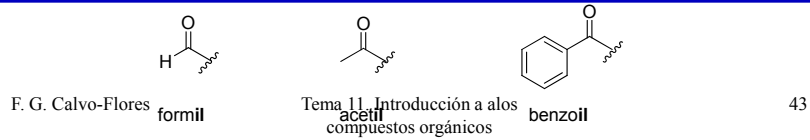
42

## Ácidos carboxílicos (-COOH)

• -oico

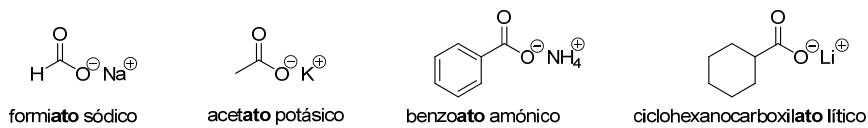


## Grupos derivados de ácidos carboxílicos

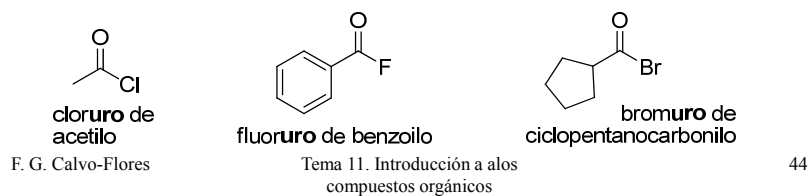


43

## Sales



## Cloruros de ácidos

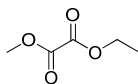


44

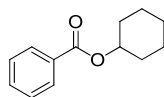
## Ésteres (-COOR)



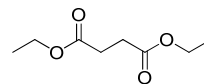
acetato de etilo



oxalato de etilo y metilo

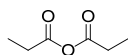


benzoato de ciclohexilo



succinato de dietilo

## Anhídridos (-CO-O-CO-)



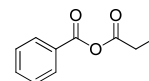
anhídrido propiónico

F. G. Calvo-Flores



anhídrido acético fórmico

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos



anhídrido benzoico propiónico

45

## Compuestos nitrogenados

- Aminas
- Amidas
- Nitrilos
- Nitrocompuestos

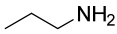
F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

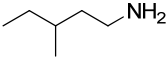
46

## Aminas (-NH<sub>2</sub>)

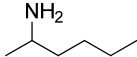
- -amina



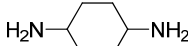
1-propan-1-**amina**



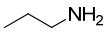
3-metilpentan-1-**amina**



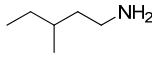
hexan-2-**amina**



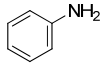
ciclohexano-1,4-**diamina**



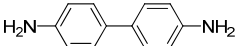
propil-1-**amina**



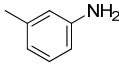
3-metilpentil-1-**amina**




anilina




bencidina



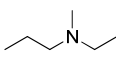
*m*-toluidina




**N,N**-dimetil**et**an**amina**



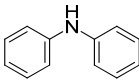
trietil**amina**




**N,N**-dimetil**propil**am**ina**



**N**-etil**anilina**



difenil**amina**

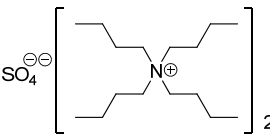


**N,N**-dimetil**anilina**

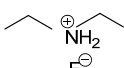
compuestos orgánicos

## Sales de amonio

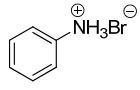
sulfato de tetrabutilamonio



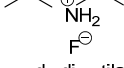
cloruro de etilamonio



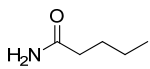
bromuro de anilinio



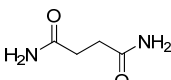
fluoruro de dimetilamonio



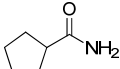
## Amidas (CONRR')



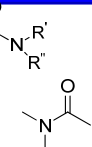
pentan**amida**



succin**amida**

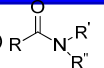


ciclopentanocarbox**amida**



**N,N**-dimetilacet**amida**

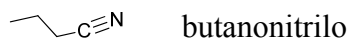
amidas primarias (monocilamidas)



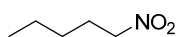
F. G. Calvo-Flores
Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos
48



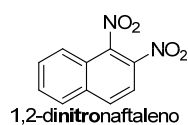
## Nitrilos (-C≡N)



## Nitrocompuestos (-NO<sub>2</sub>)



nitropentano



1,2-dinitronaftaleno

F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

49

## Compuestos de azufre

- Tioles
- Sulfuros
- Sulfóxidos
- Sulfonas
- Ácidos sulfónicos

F. G. Calvo-Flores

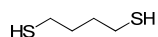
Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

50

## Tioles (-SH)



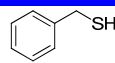
propano**tiol**



butano-1,4-**ditiol**



benzeno**tiol**

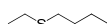


fenilmetano**tiol**

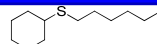
## Sulfuros (-S-)



metilmetilciclopentano



etilbutano



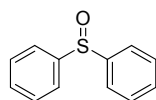
ciclohexilhexano

F. G. Calvo-Flores

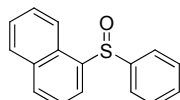
Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

51

## Sulfóxidos -SO-



difenil**sulfóxido**

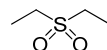


fenil-1-naftil**sulfóxido**

## Sulfonas -SO<sub>2</sub>-



ciclopropilmetil**sulfona**



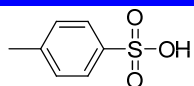
dietil**sulfona**

F. G. Calvo-Flores

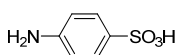
Tema 11. Introducción a los  
compuestos orgánicos

52

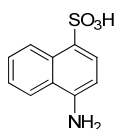
## Ácidos sulfónicos (-SO<sub>3</sub>H)



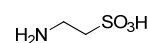
ácido 4-metilbencenosulfónico



ácido sulfanílico



ácido naftiónico



taurina

F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos

53

## Compuestos polifuncionales

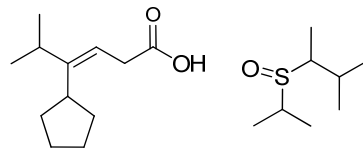
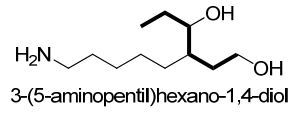
Orden de prioridad	Grupo funcional	Formula	Orden de prioridad	Grupo funcional	Formula
1	Ácidos carboxílicos	-COOH	8	Cetona	-CO
2	Ácidos sulfónicos	-SO <sub>3</sub> H	9	Alcohol	-OH
3	Ester	-COOR	10	Fenol	-OH
4	Cloruros de ácido	-COCl	11	Tiol	-SH
5	Amida	-CONH <sub>2</sub>	12	Amina	-NH <sub>2</sub>
6	Nitrilo	-CN	13	Eter	-OR
7	Aldehido	-CHO	14	Sulfuro	-SR

F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos

54

## Ejemplos



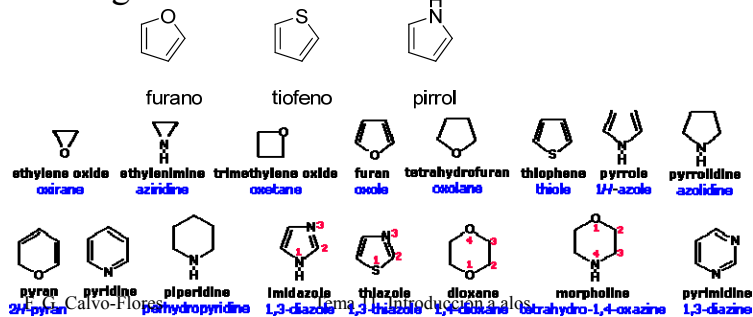
F. G. Calvo-Flores

Tema 11. Introducción a los compuestos orgánicos

55

## Heterociclos

- Pentagonales con un heteroátomo
- Pentagonales con dos heteroátomos
- Hexagonales con un heteroátomo
- Hexagonales con dos heteroátomos



56