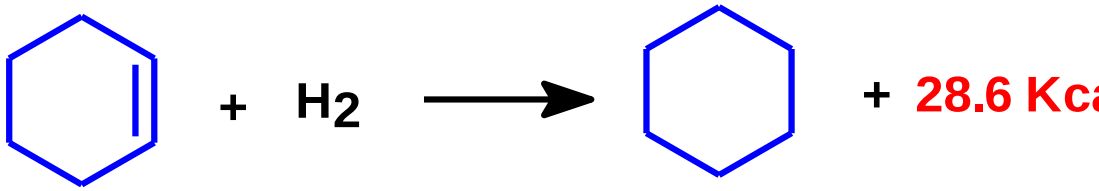
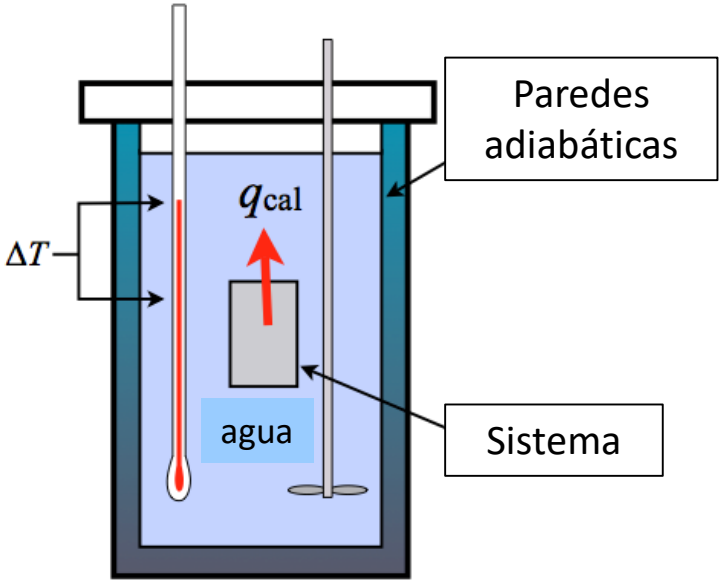
ESTRUCTURA Y AROMATICIDAD DE ANILLOS HETEROCÍCLICOS

CALORES DE HIDROGENACIÓN COMO INDICADORES DE LA ESTABILIDAD

La **adición de H_2** a un C=C es normal que libere (**calor de hidrogenación**) alrededor de 28.6 Kcal/mol (120 kJ/mol)

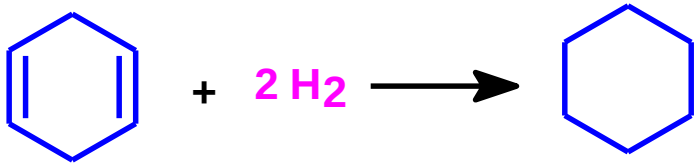




Bomba calorimétrica

Dos **dobles enlaces aislados**:

- Teórico 2(28.6 Kcal/mol) = 57.2 Kcal/mol
- Se liberan 57.4 Kcal/mol (experimental)



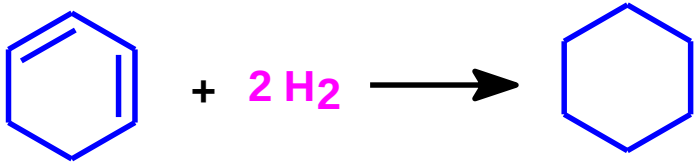
teórico: 57.2 Kcal/mol

+ 57.4 Kcal/mol (experimental)

$\Delta H° = -57.4$ Kcal/Mol

Dos **dobles enlaces conjugados**

- Teórico 2(28.6 Kcal/mol) = 57.2 Kcal/mol
- Se liberan 55.4 Kcal/mol.



teórico: 57.2 Kcal/mol

+ 55.4 Kcal/mol (experimental)

$\Delta H° = -57.2$ Kcal/Mol

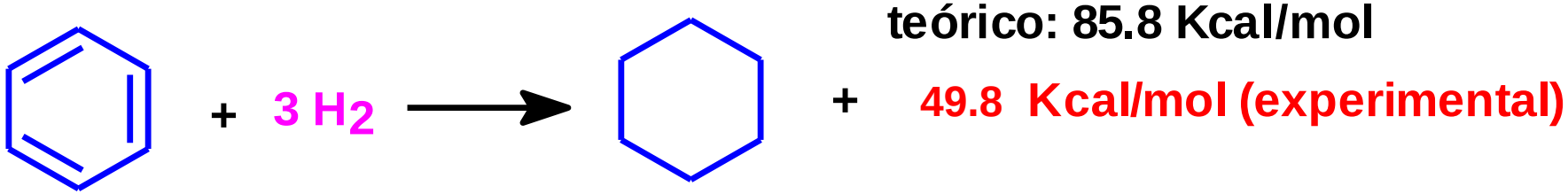
$\Delta H° = -55.4$ Kcal/Mol

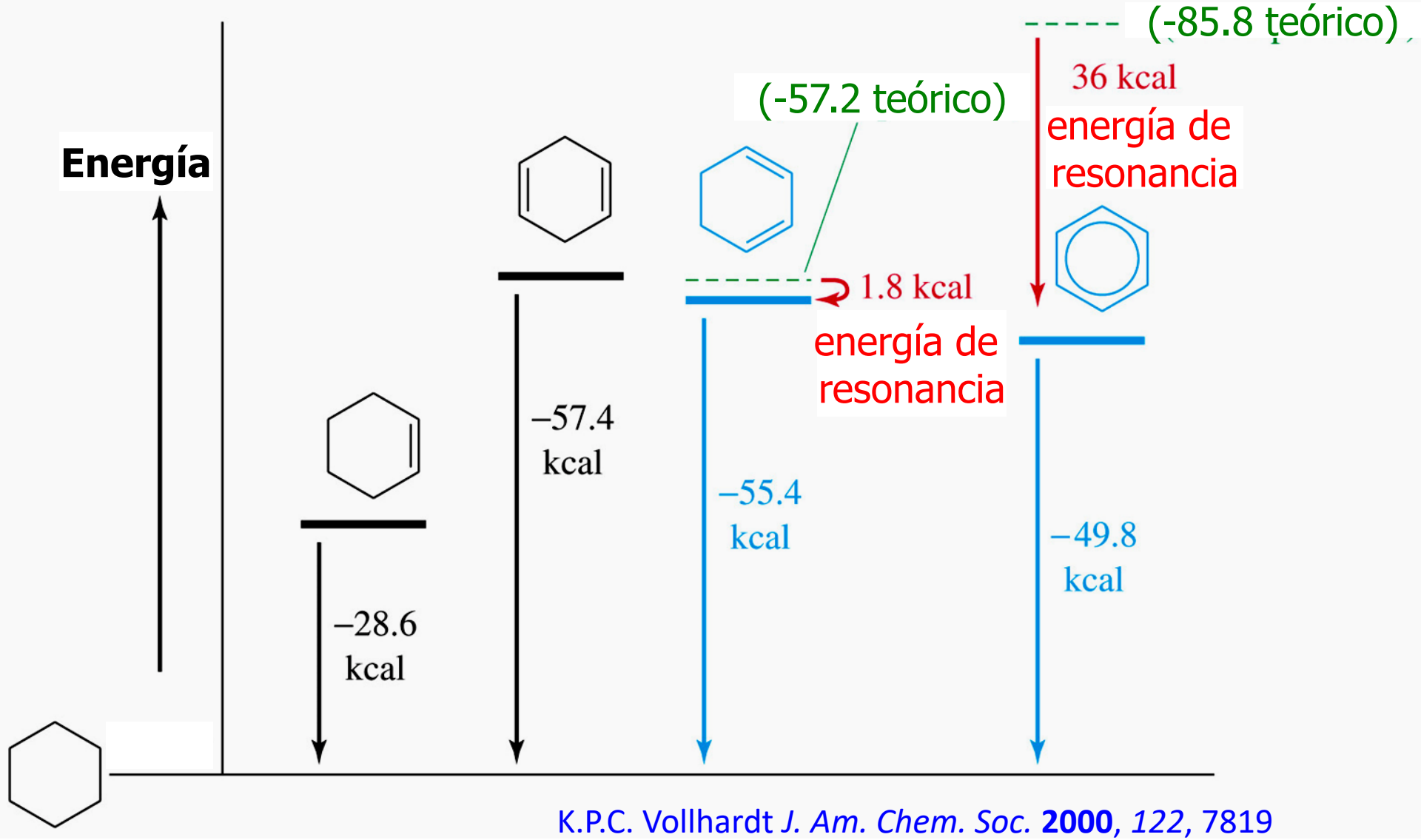
$\Delta H° = -1.8$ Kcal/mol

- A esta diferencia se le llama **energía de resonancia**

1,3,5-ciclohexanotrieno

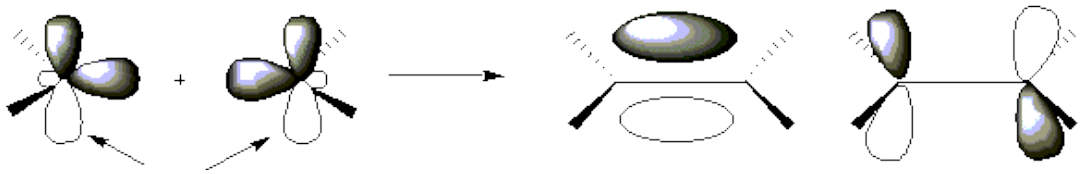
- 3 dobles enlaces:
  Teórico: 3(28.6 Kcal/mol) = 85.8 Kcal/mol
- Experimental: 49.8 Kcal/mol
- En consecuencia el Benceno tiene alrededor de 36 Kcal/mol más de **"estabilidad", energía de resonancia**





K.P.C. Vollhardt *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, *122*, 7819

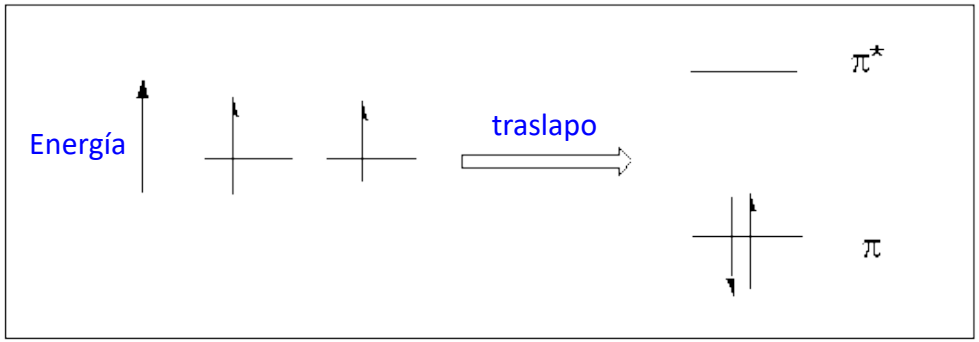
Un alqueno



Orbitales atómicos
2 x p

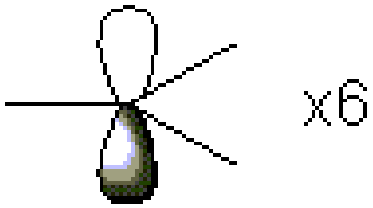
Orbital molecular
de enlace (π)

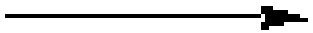
Orbital molecular
de enlace (π*)

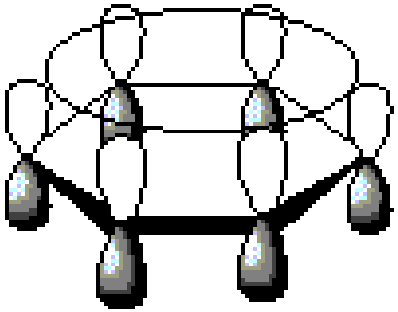


Orbital atómico p

Benceno



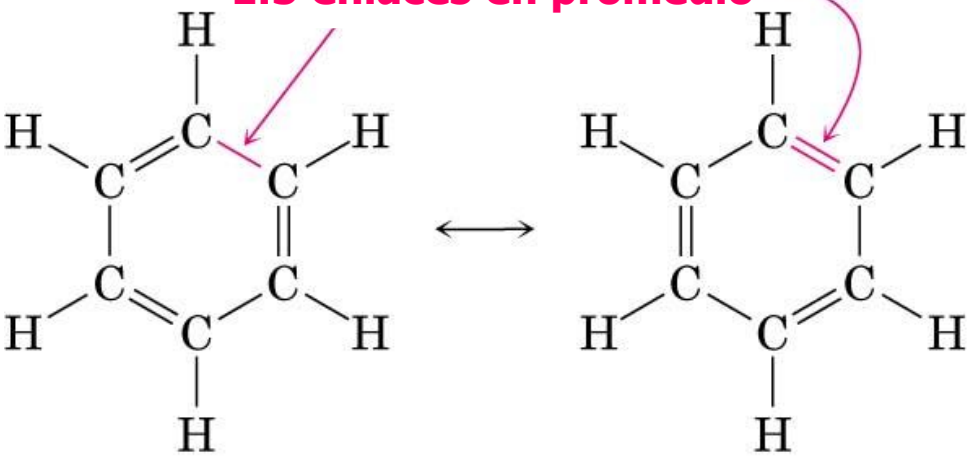


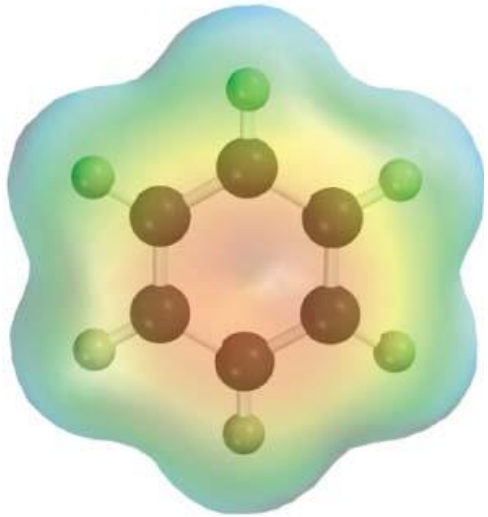


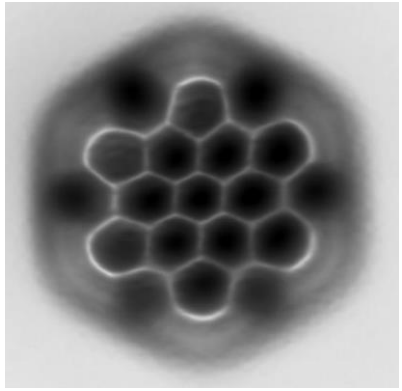
C con hibridación sp^2

Sistema π deslocalizado

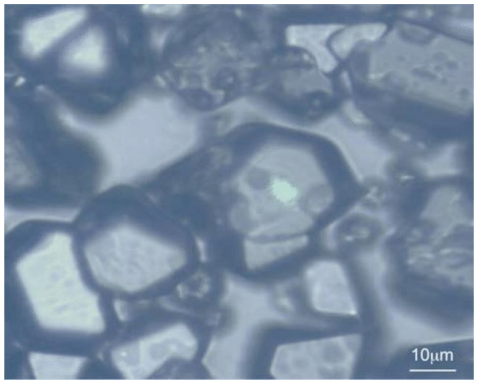
1.5 enlaces en promedio



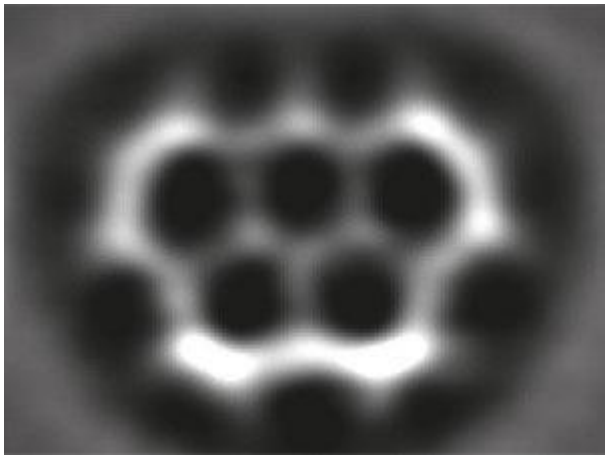




https://i.imgur.com/vMSL25I.jpg

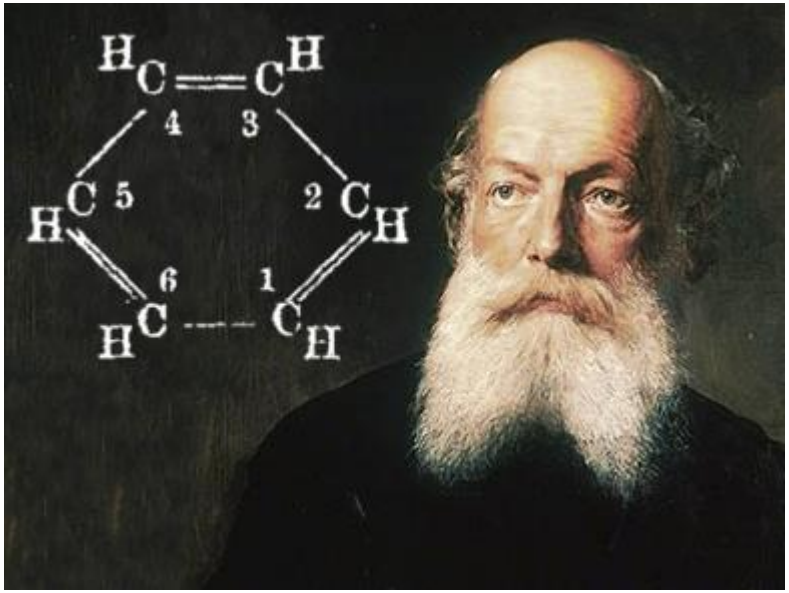


Photograph of benzene crystals formed by cooling of a benzene liquid drop to 94 K in the cryostage , using a 50x objective.

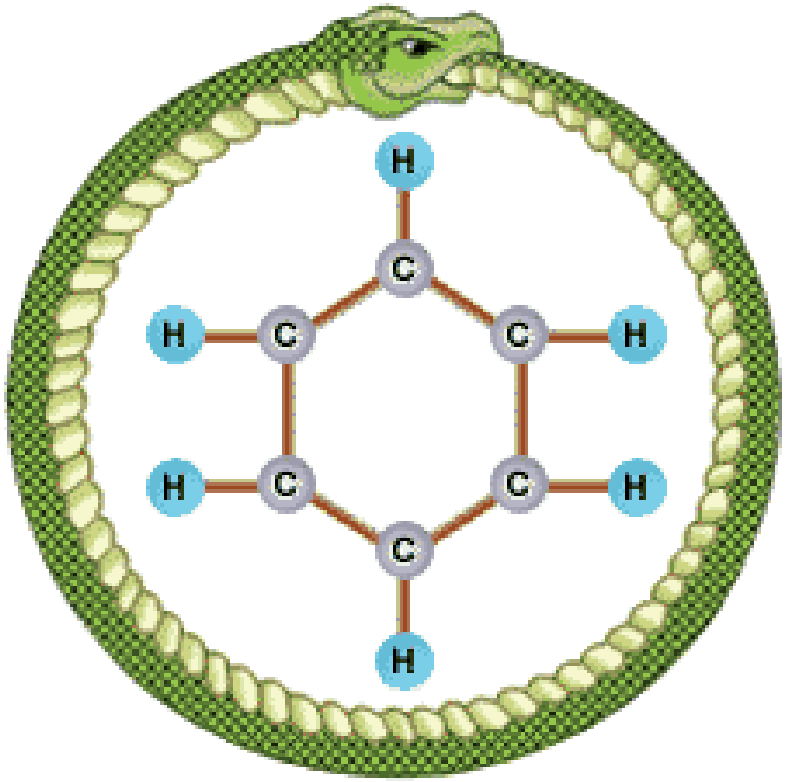


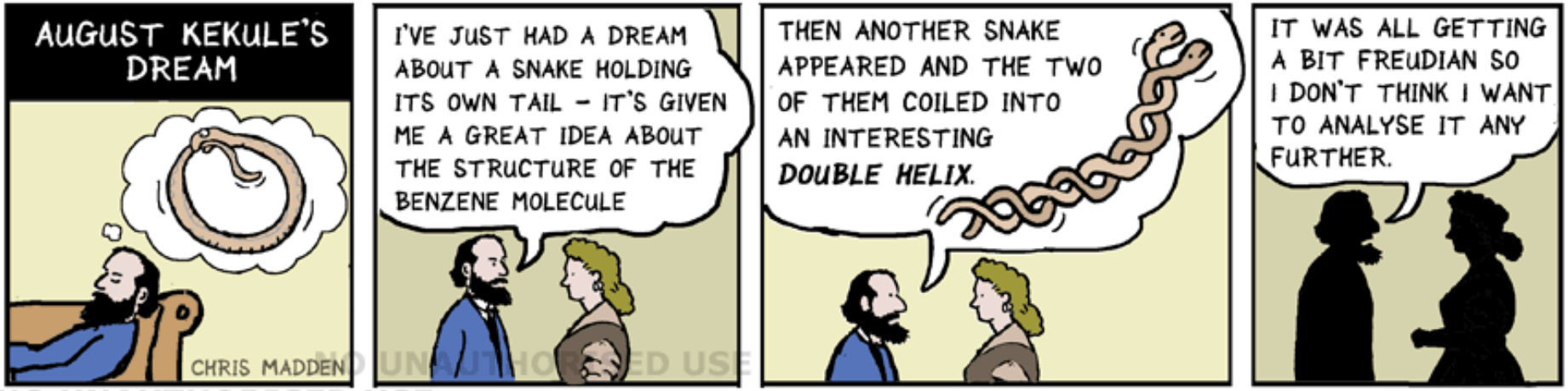
Warwick, UK, synthesised olympicene – a polyaromatic hydrocarbon of five fused rings. For maximum impact, they collaborated with Leo Gross and coworkers at IBM's research lab in Zurich, Switzerland, to obtain a direct image of the molecule using a scanning tunnelling microscope (STM) with a single-atom tip.

https://www.chemistryworld.com/opinion/imaging-icons/5178.article



Friedrich August Kekule von Stradonitz
(1829 – 1896)
Químico orgánico alemán



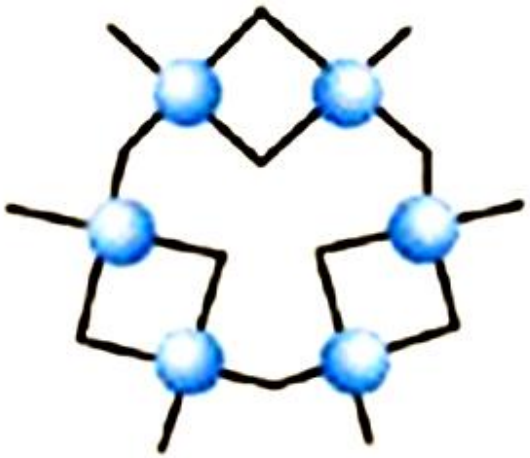


C_1H_1

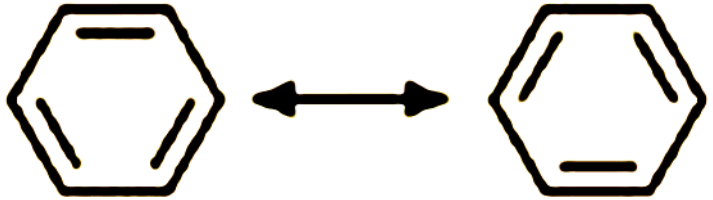
Fórmula empírica del benceno (Faraday)

C_6H_6

Fórmula molecular del benceno



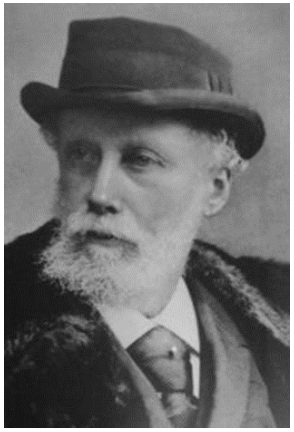
Ciclohexatrieno de Kekule



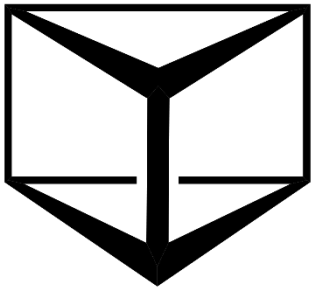
Benceno de Kekule

Benceno de Dewar

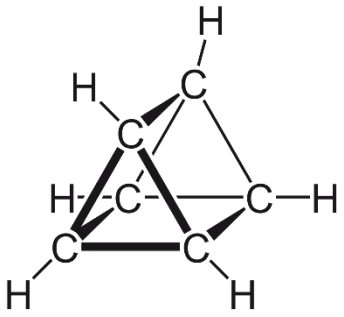
Estructuras de Landerburgh

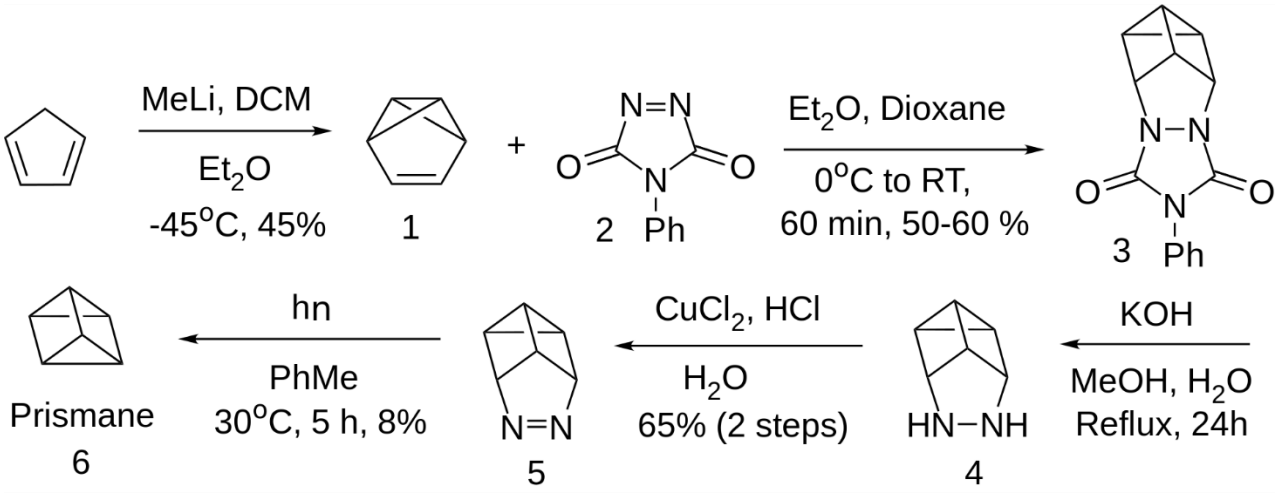


Albert Ladenburg
(1842 – 1911)
Químico alemán



Prismano
C_6H_6





"Synthesis of Prismane".

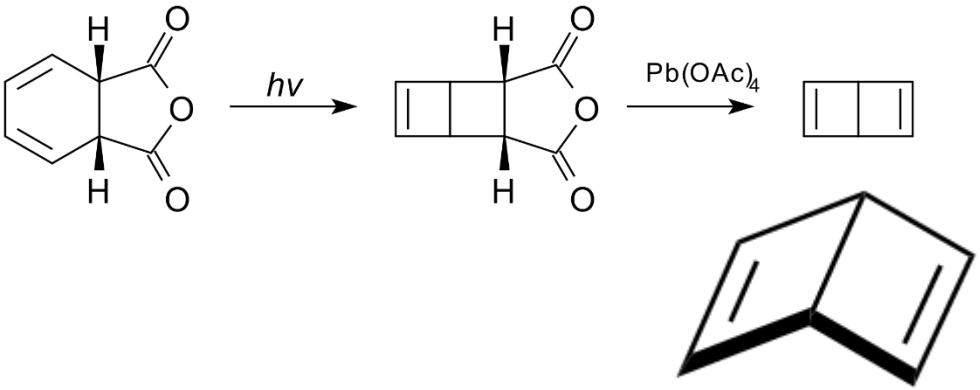
^ *Katz, T. J.; Acton, N. (1973). "Synthesis of prismane". Journal of the American Chemical Society.* ***95*** *(8): 2738. doi:10.1021/ja00789a084.*

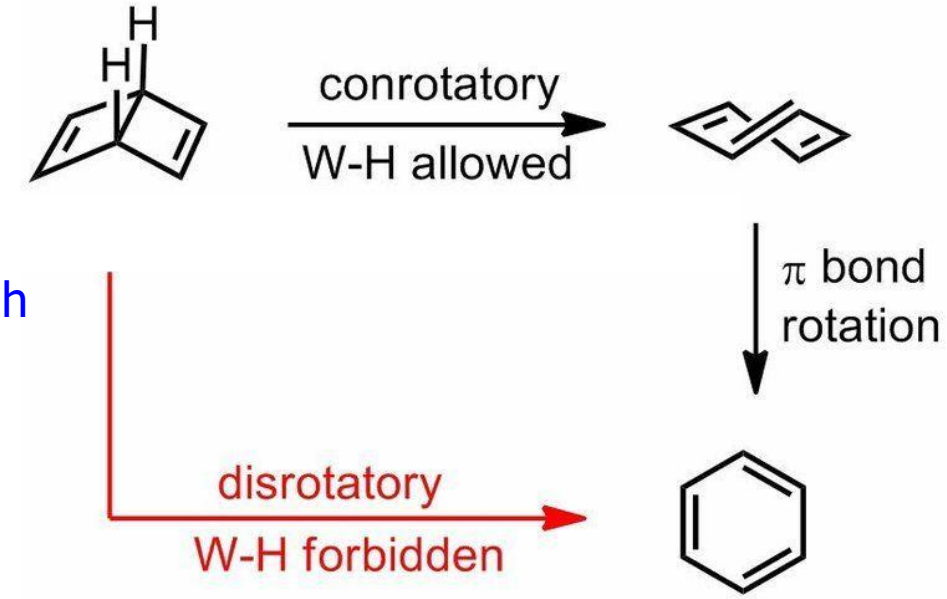
^ *Katz, T. J.; Wang, E. J.; Acton, N. (1971). "Benzvalene synthesis". Journal of the American Chemical Society.* ***93*** *(15): 3782. doi:10.1021/ja00744a045.*

Sir James Dewar FRS FRSE
(1842 –1923)
Físico y químico escoses

FRS
Fellow of the Royal Society

FRSE
Fellow of the Royal Society of Edinburgh





Wilhelm Körner
(1839 - 1925)
Químico orgánico alemán
Trabajó en la Universidad de Milán, Italia

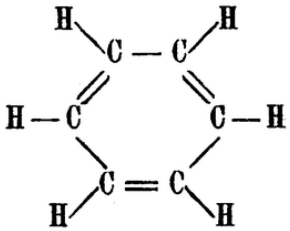
WILHELM KÖRNER (1839–1925)

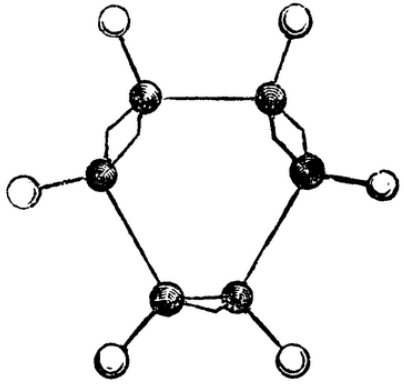
Körner was a collaborator of August Kekulé and Stanislao Cannizzaro; afterward, he was professor of chemistry in Milano, Italy. His work is especially connected with Kekulé's formula of benzene. He was the first to determine the "chemical place" in the aromatic compounds (1:2, 1:3, 1:4). He explained the construction of resorcin and worked on pyridine.

For note about the Kekulé Album contributed by Dr. E. Berl, of Carnegie Institute of Technology, see page 407. Dr. Berl also lent the photograph here reproduced.

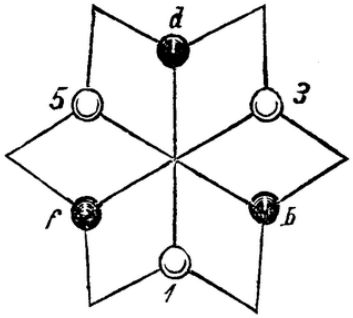
Journal of Chemical Education 1937, 14, 9, 401

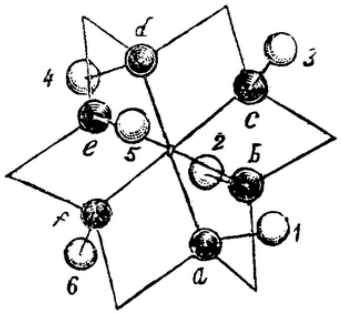
Modelo de benceno de Wilhelm Körner.





Arriba: fórmula de benceno de Kekulé realizada por su modelo de carbono tetraédrico





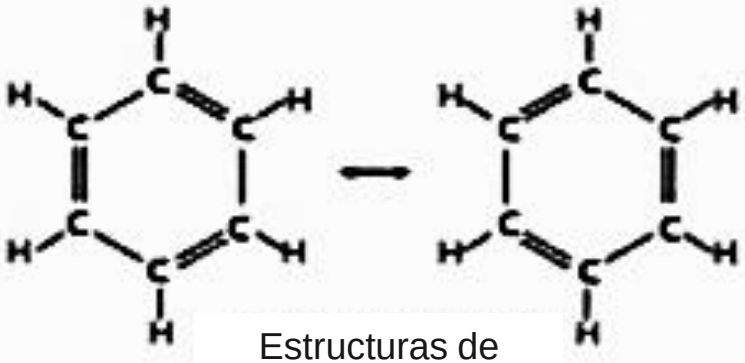
Abajo: propuesta de Körner con los átomos de carbono (esferas oscuras) aproximadamente en lo que hoy sería una conformación de 'silla', tres átomos de hidrógeno arriba y tres debajo del núcleo C_6H_6.

Körner, W.; *Giornale di Scienze Naturali ed Economiche di Palermo* **1869,** *5,* 237, 241

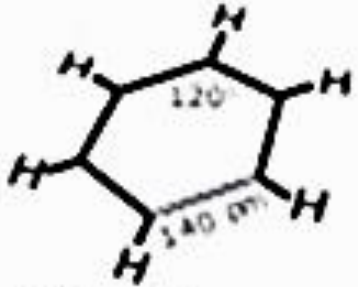
C_1H_1 Fórmula empírica del benceno (Faraday)

C_6H_6

Fórmula molecular del benceno

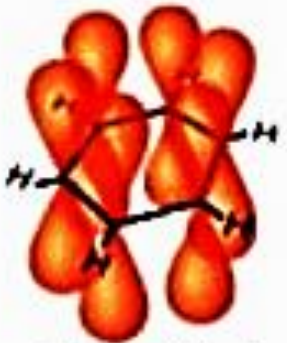


Estructuras de Kekulé (isómeros)



Hexagono (plano)
Longitudes de enlace
140 pm
1.4 angstrom

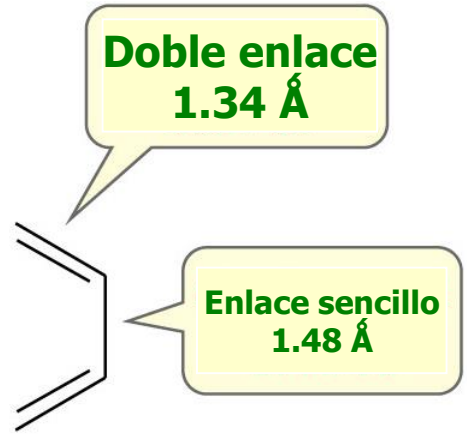
Enlaces sigma formados con orbitales híbridos sp^2



Orbitales p_z
en cada átomo de C

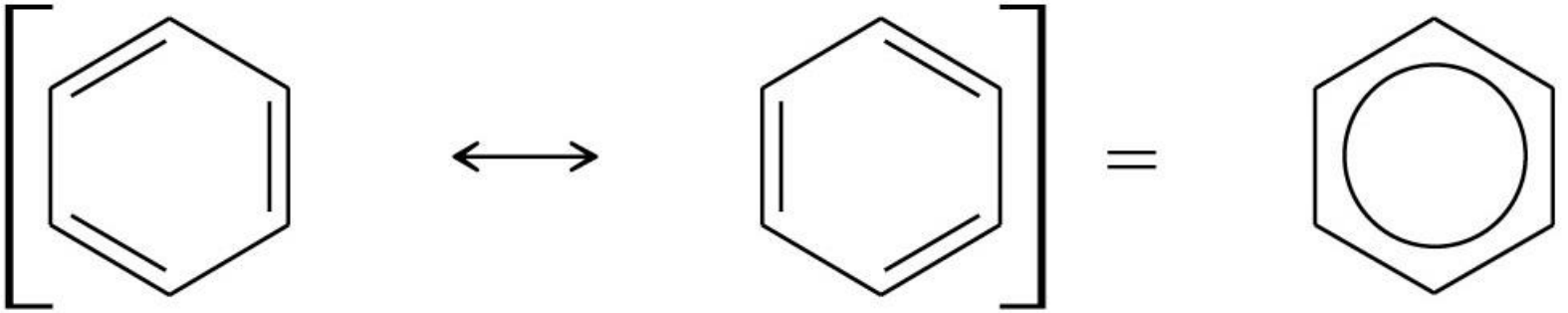
Sistema deslocalizado π

Anillo de benceno
Descripción simplificada



BUTANODIENO

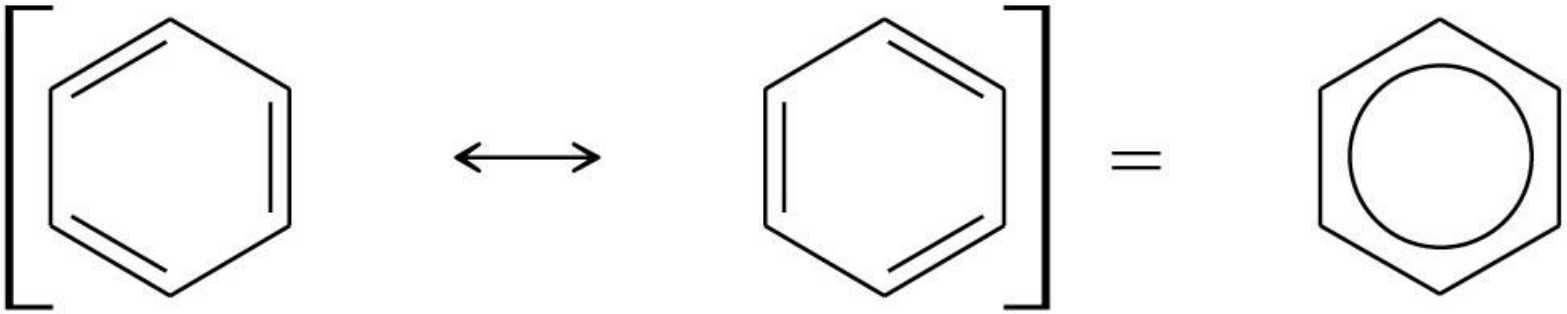
Todas las longitudes de los enlaces C-C son 1.397 Å

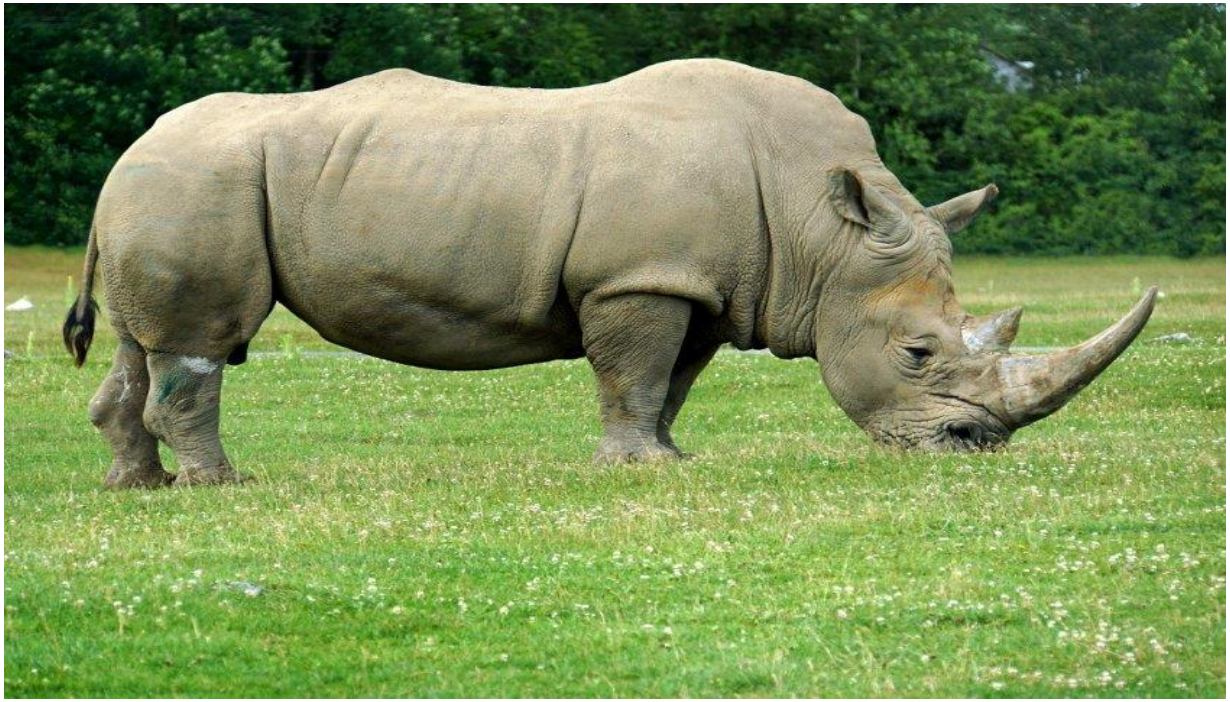


Representación de la resonancia

Orden de enlace = 1.5

REPRESENTACIÓN COMBINADA





The role of delocalization in benzene

Eric D. Glendening. Rudiger Faust, Andrew Streitwieser, K. Peter C. Vollhardt, Frank Weinhold

J. Am. Chem. Soc. **1993**, 115, 23, 10952–10957

Los orígenes de esta estabilidad se encuentran en la mecánica cuántica, o aromaticidad, la cual fue modelada por primera vez por Hückel en 1931. El fue el primero en separar los electrones de enlace en electrones σ y en electrones π.

Erich Armand Arthur Joseph Hückel

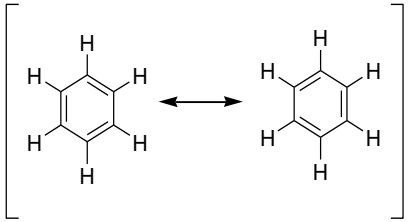
http://people.clarkson.edu/~ekatz/scientists/huckel4.jpg

Propuso una regla empírica para determinar la aromaticidad

Hückel, E. (1931). "Quantum-theoretical contributions to the benzene problem. I. The electron configuration of benzene and related compounds"

Hückel, E.; *Z. Phys.* **1931**, *70*, 204-286 *Z. Phys = Zeitschrift für Physik*

Un compuesto aromático contiene un conjunto de átomos unidos por medio de enlaces covalentes con características específicas:

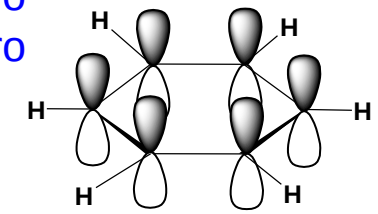


Un sistema conjugado (deslocalizado), el cual es común encontrarlo en un arreglo en el que se alternan enlaces sencillos con dobles.

Una estructura coplanar, encontrándose todos los átomos que contribuyen en el mismo plano.

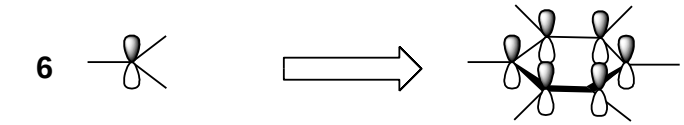
Los átomos que contribuyen se encuentran en uno o más anillos.

Un cierto número de electrones deslocalizados (que puede ser par, pero no un múltiplo de 4. Esto se conoce como la regla de Hückel. El número de electrones π(lo determina la relación



(4n + 2) electrones (donde n es un número entero, n = 0, 1, 2, 3, 4,… .)

Estos compuestos muestran una reactividad especial en las reacciones orgánicas, como la sustitución electrofílica aromática (SEAr) y la sustitución nucleofílica aromática (SNAr).



CARBONO CON HIBRIDACIÓN SP^2

SISTEMA DESLOCALIZADO π

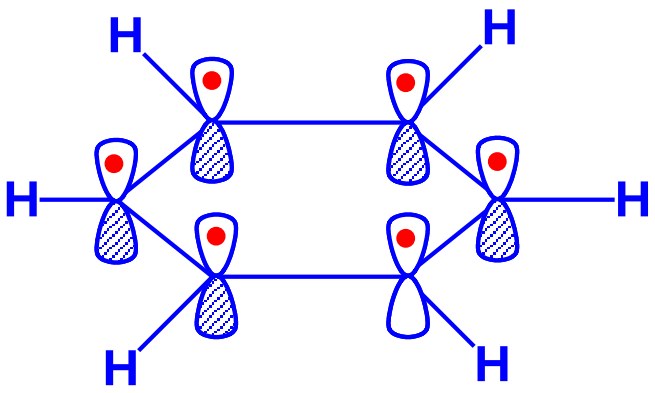
IDEAS CLAVE PARA LA ESTRUCTURA DEL BENCENO

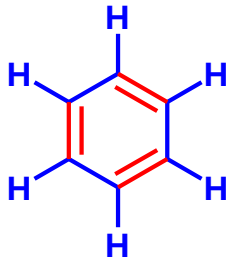
- Presenta una estabilidad poco usual – el calor de hidrogenación de 150 kJ/mol es menos negativo con respecto a un trieno cíclico
- Es un hexágono Plano: los ángulos de enlace son de 120°, la distancia del enlace carbono–carbono son de 139 pm
- Da reacciones de sustitución más que adiciones electrofílicas
- El Híbrido de Resonancia es una estructura intermedia entre las dos estructuras de linea-enlace
- Un factor más importante es el número de electrones en el orbital cíclico

AROMATICIDAD Y LA REGLA DE LOS (4n + 2) ELECTRONES π

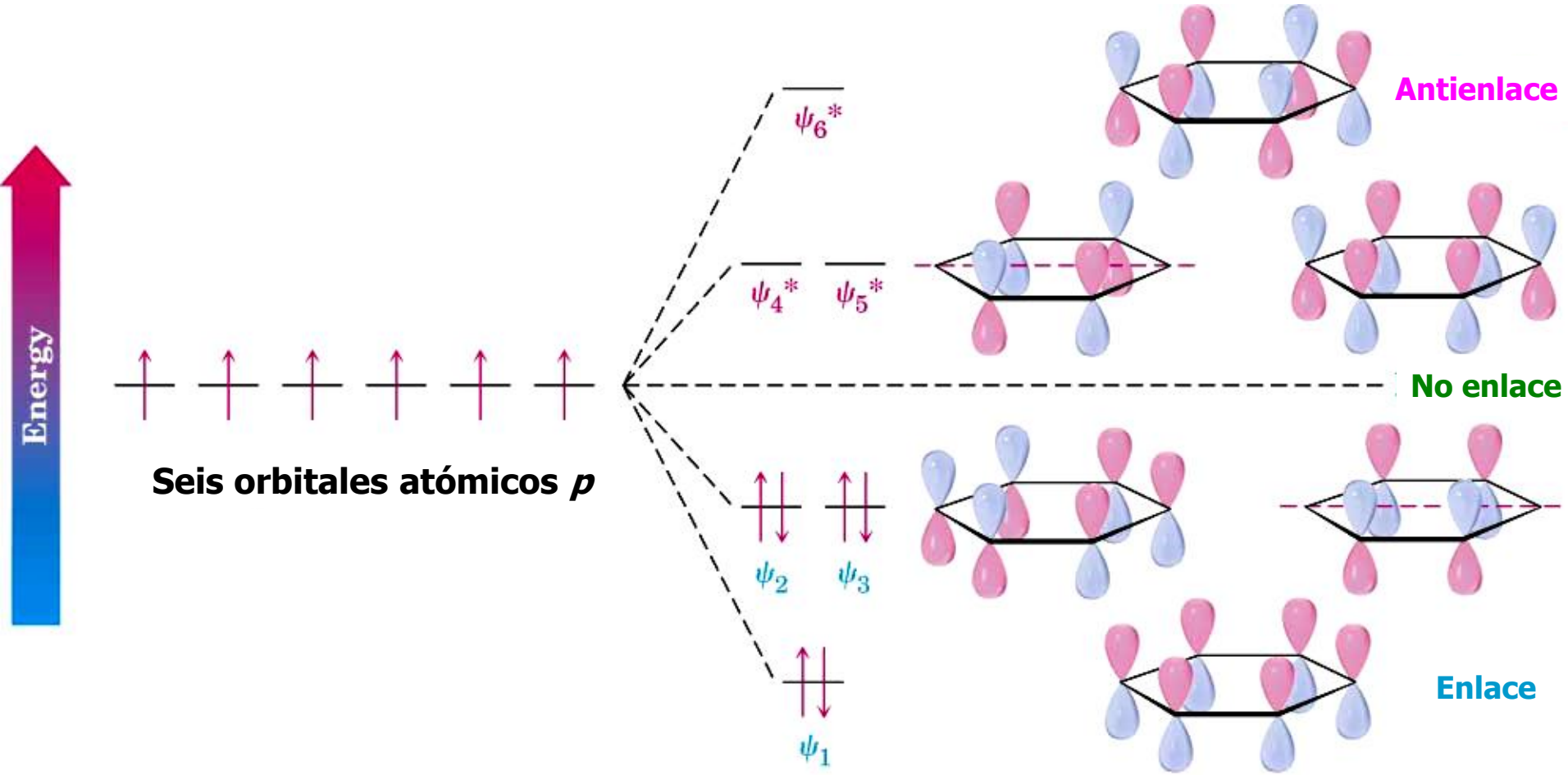
- La regla de Huckel, la cual se basa en cálculos empíricos – una molécula plana cíclica con enlaces sencillos y dobles alternados, tiene estabilidad aromática si este tiene ***4n+ 2*** *electrones π (*donde *n* es un número entero *0,1,2,3,4*)

- Para **n=1**: **4n+2 = 6**; por lo que el **benceno** es estable y los electrones π están deslocalizados

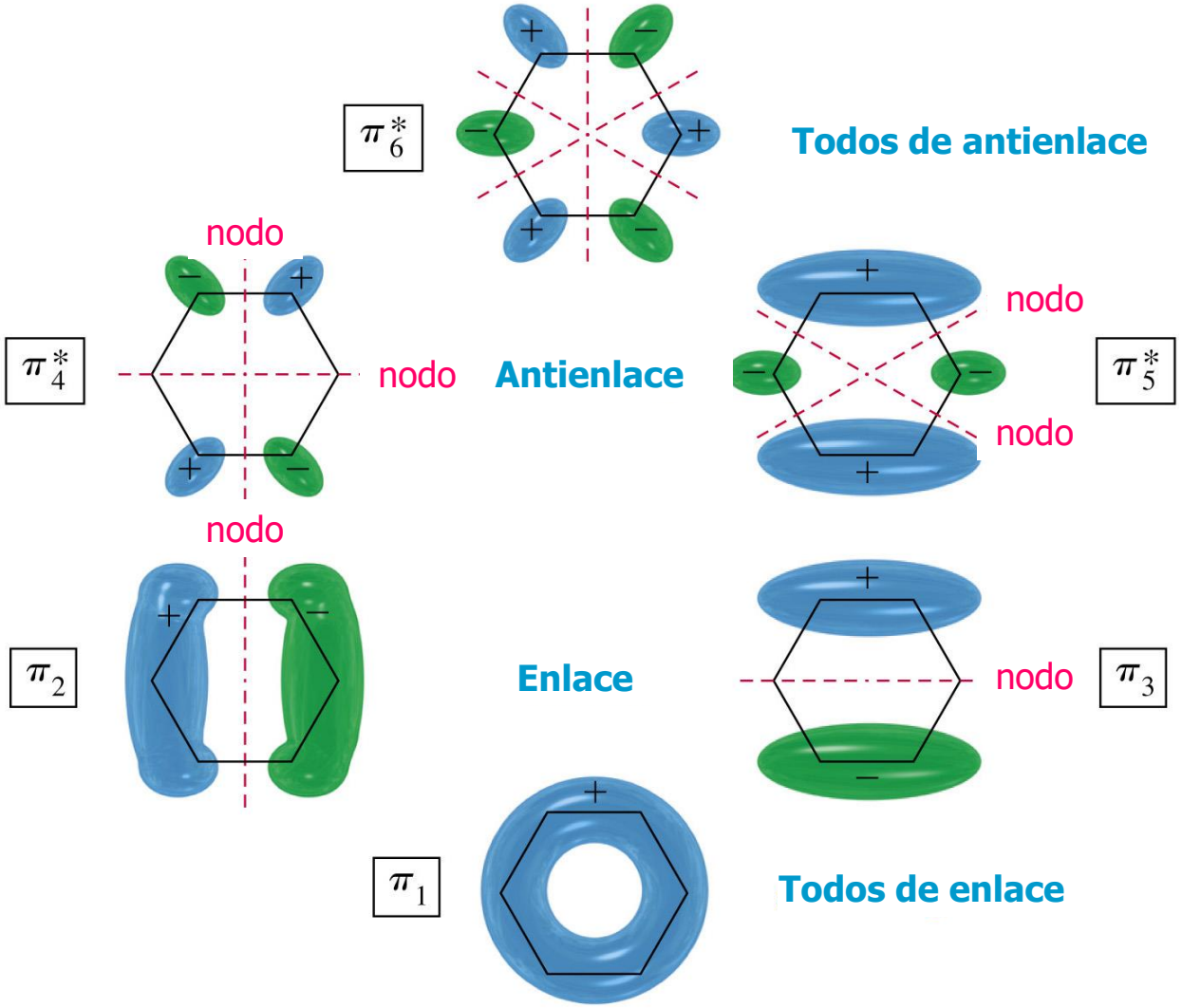




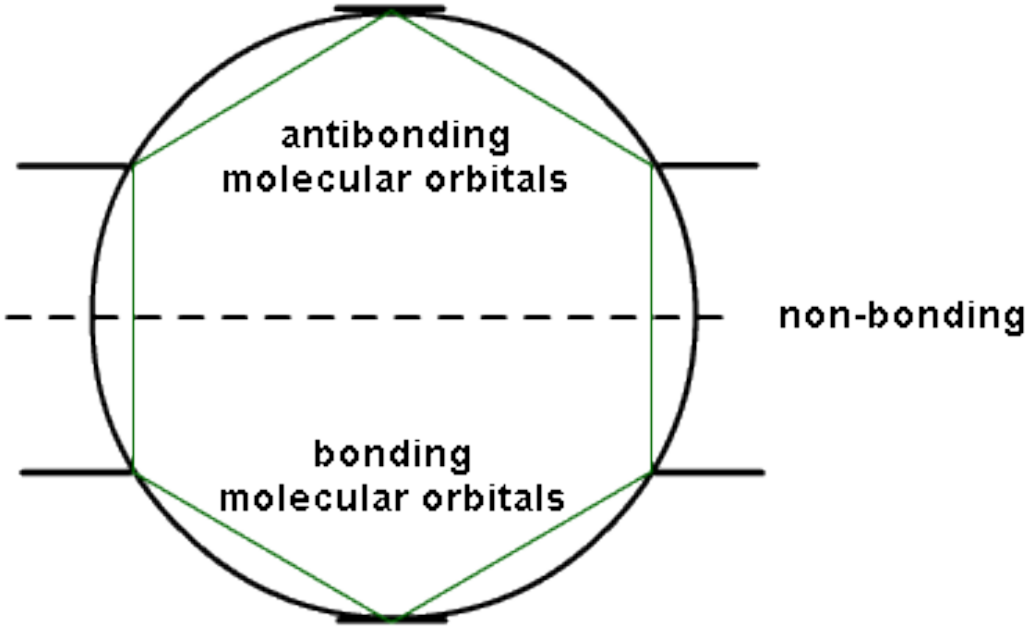
BENCENO
TRES DOBLES ENLACES
SEIS ELECTRONES π



Seis orbitales moleculares en el benceno


π_6^*
Todos de antienlace
nodo
π_4^*
nodo
Antienlace
nodo
nodo
π_5^*
nodo
π_2
Enlace
nodo
π_3
π_1
Todos de enlace

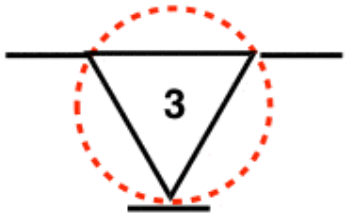
Arthur A. Frost, Boris Musulin:
A Mnemonic Device for Molecular Orbital Energies.
The Journal of Chemical Physics. Band 21, Nr. 3, 20. Dezember 2004, S. 572–573, doi:10.1063/1.1698970.

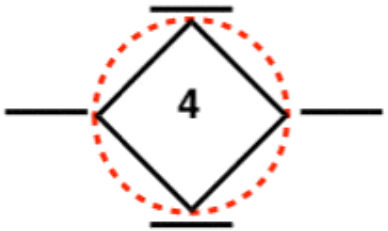


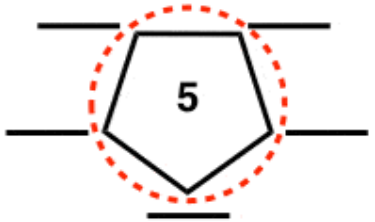
A useful mnemonic for drawing energy levels in cyclic pi systems:

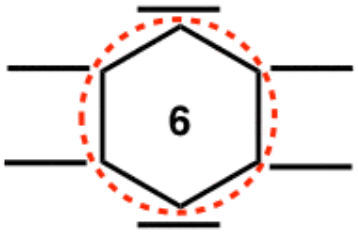
"Frost Circles" (aka "the polygon method")

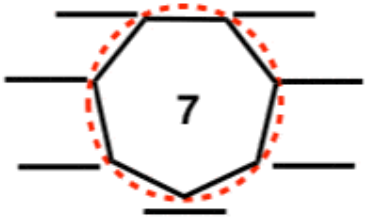
"A circle... is inscribed with a polygon with one vertex pointing down; the vertices represent energy levels with the appropriate energies."

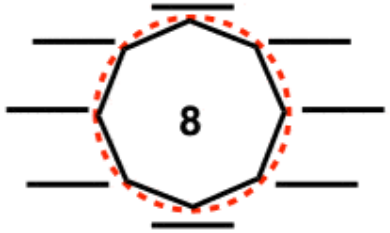


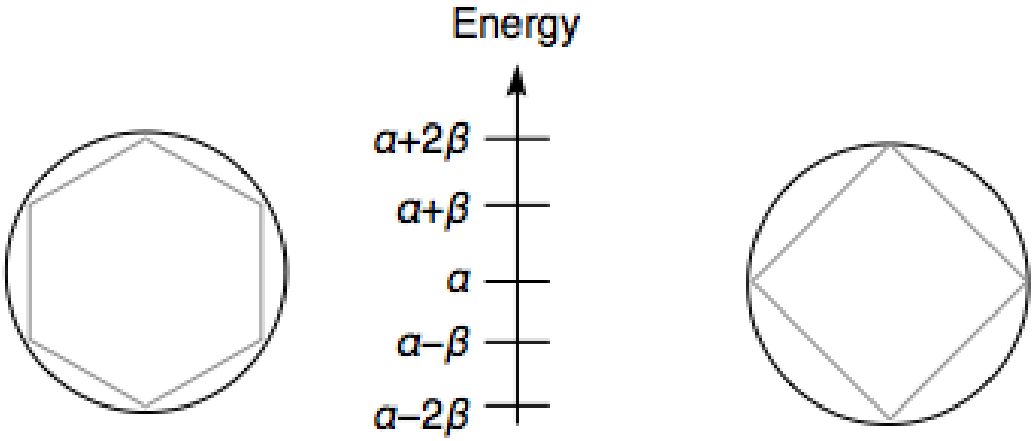


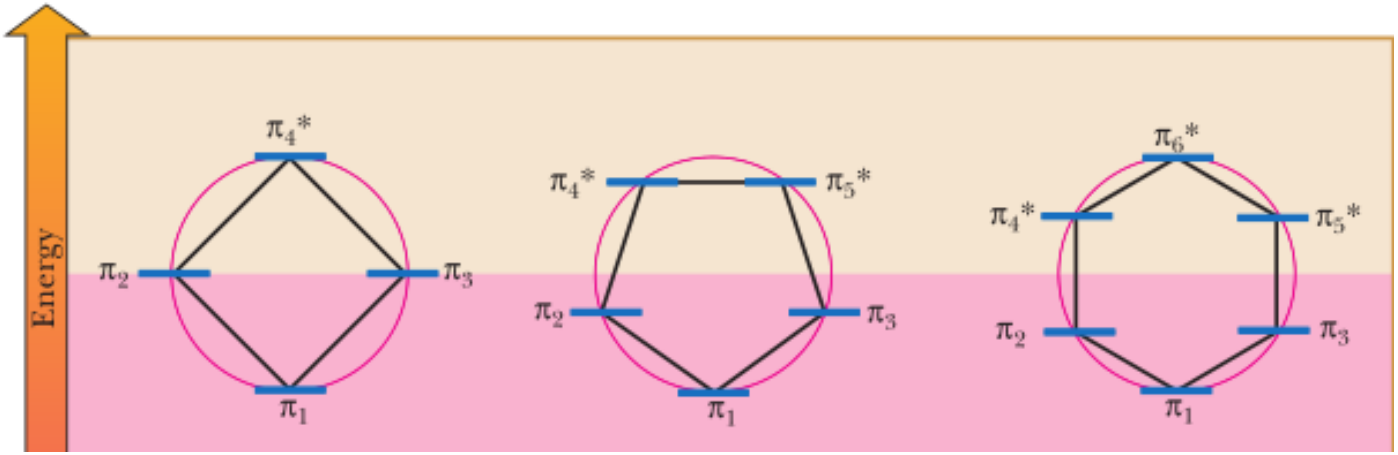




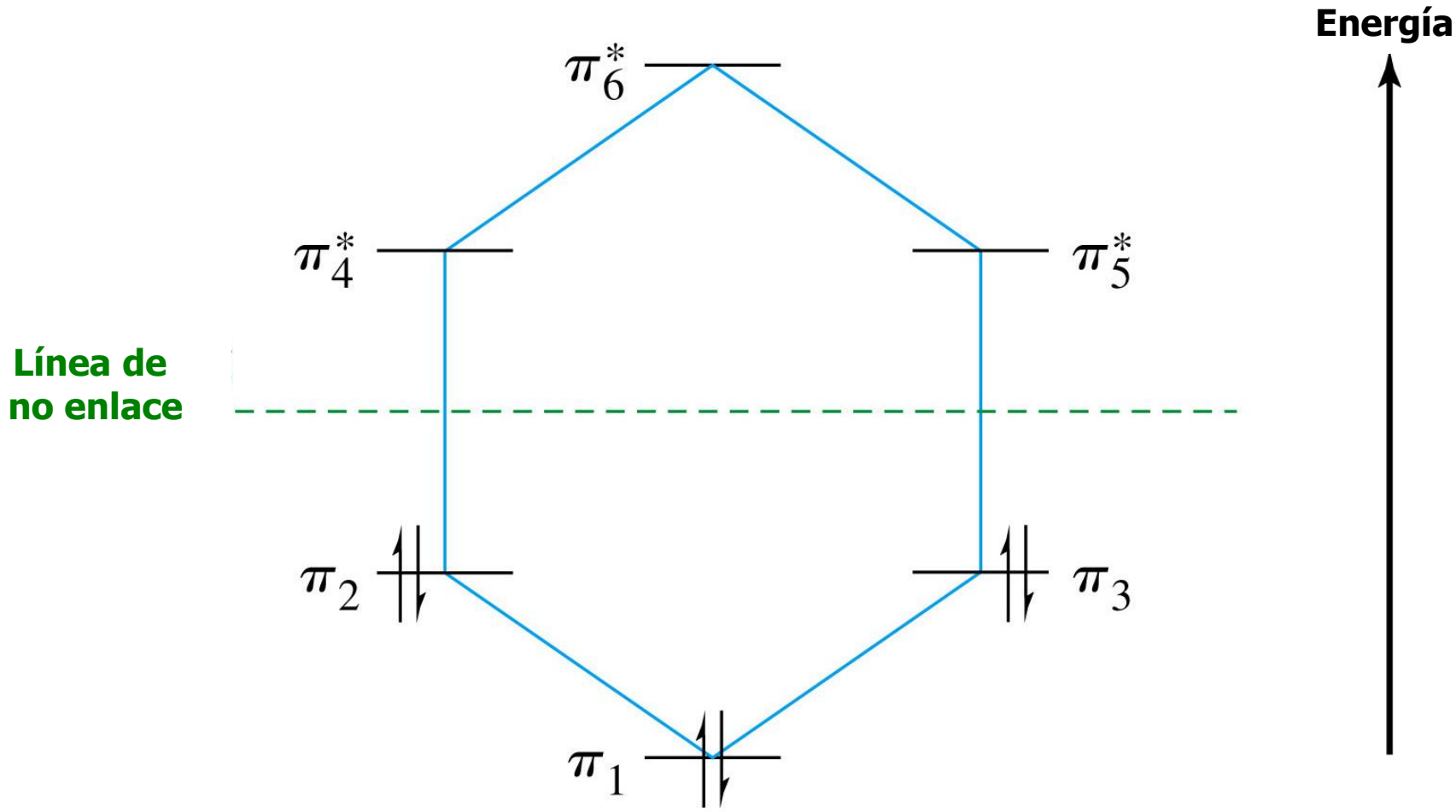








Círculos de Frost que muestran el número y las energías relativas de los OM π para compuestos cíclicos, completamente conjugados de 4, 5 y 6 átomos


Energía
π_6^*
π_4^*
π_5^*
Línea de no enlace
π_2
π_3
π_1

Las reglas de aromaticidad de Huckel son:

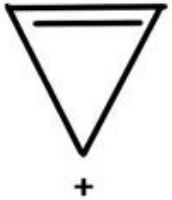
1) La molécula es cíclica
2) Tiene un orbital π por átomo del anillo plano
3) En un orbital con hibridación sp^2, sobre cada átomo del anillo
4) Tener una estructura cíclica con

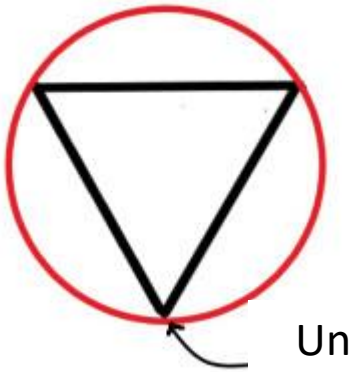
$(4n + 2)$ electrones π,

donde n es igual a cualquier número entero (0,1,2,3,…)

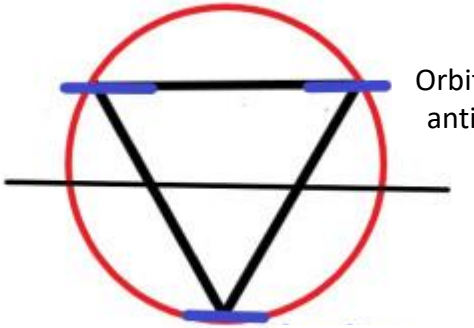
¿Es aromático el catión ciclopropenilo?

Carbocatión ciclopropenilo





Un vértice hacia abajo



Orbitales de antienlace

Orbitales de enlace

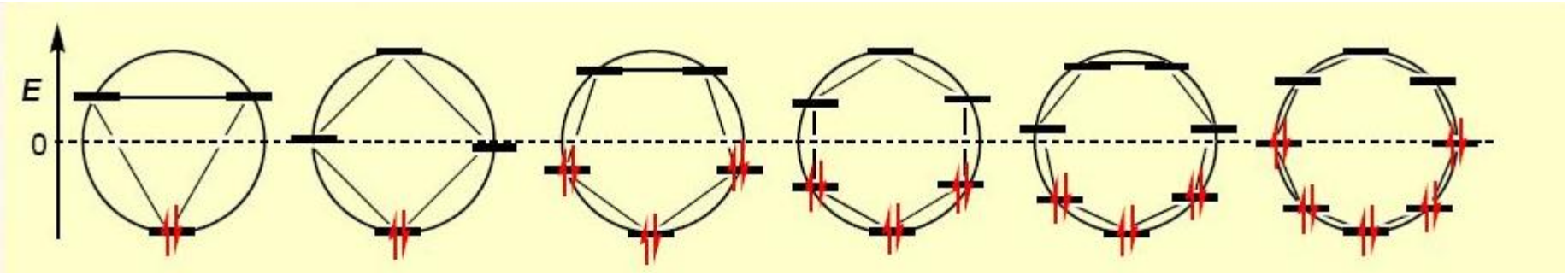
Energía

Orbitales de antienlace

Orbitales de enlace

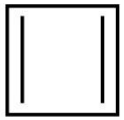
Diagramas de Musulin-Frost: Diagramas de orbitales moleculares sin las matemáticas
Regla nemotécnica gráfica para construir los diagramas de energía de los orbitales moleculares

Frost, A. A.; Musulin, B. J.; J. Phys. Chem. **1953**, *21*, 572

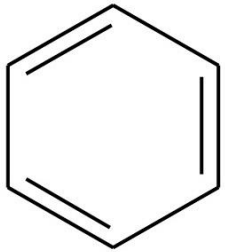


Catión ciclopropenilo	Dicatión ciclobutadienilo	Anión ciclopentadienilo	Benceno	Catión cicloheptatrienilo (tropilo)	Dianión ciclooctatetraenilo
2 e π	2 e π	6 e π	6 e π	6 e π	10 e π

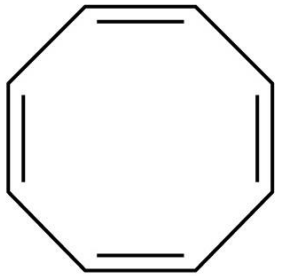
ANULENOS



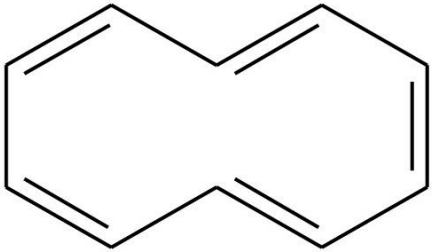
Ciclobutanodieno
[4]-anuleno



Benceno
[6]-anuleno

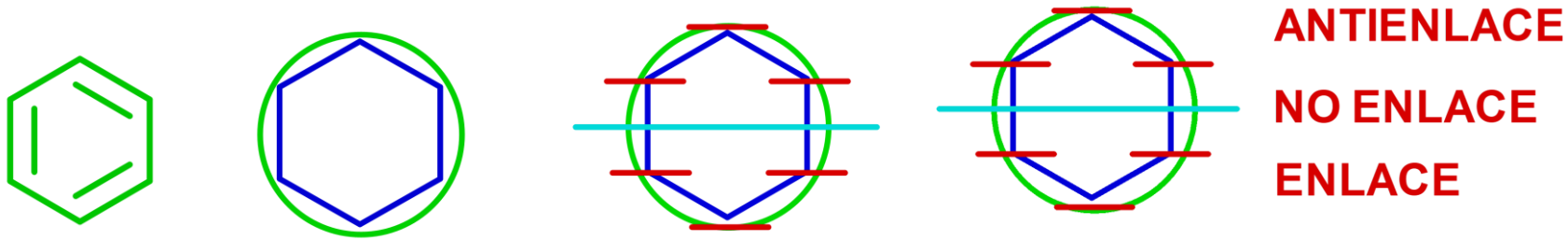


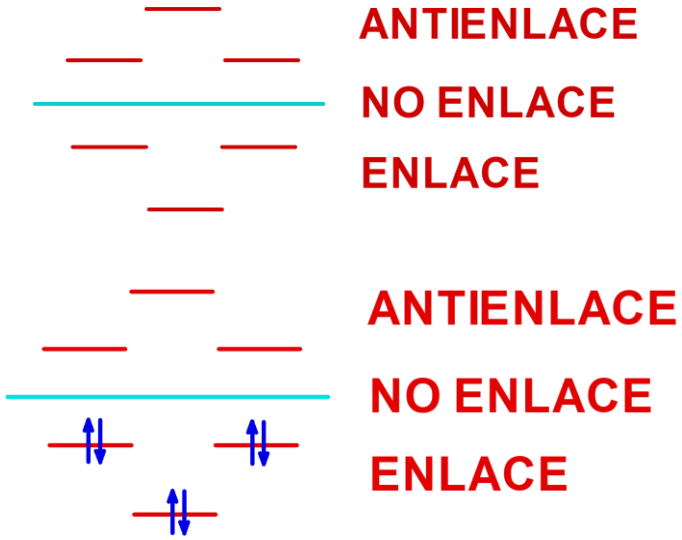
Ciclooctanotetraeno
[8]-anuleno



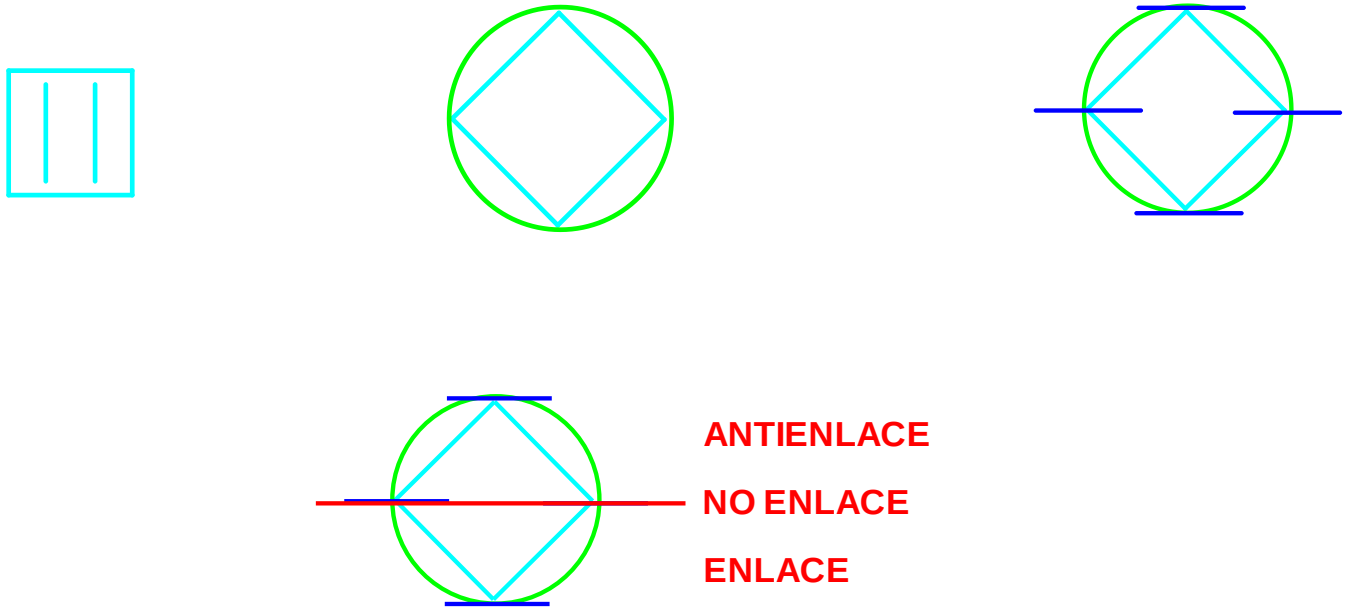
Ciclodecapentaeno
[10]-anuleno

DIAGRAMAS DE MUSULIN Y FROST

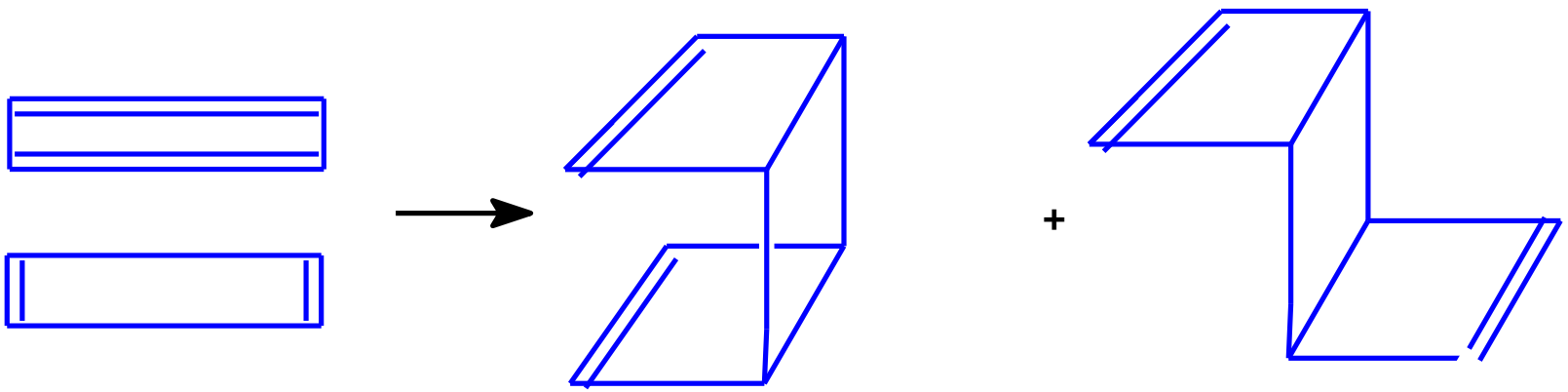




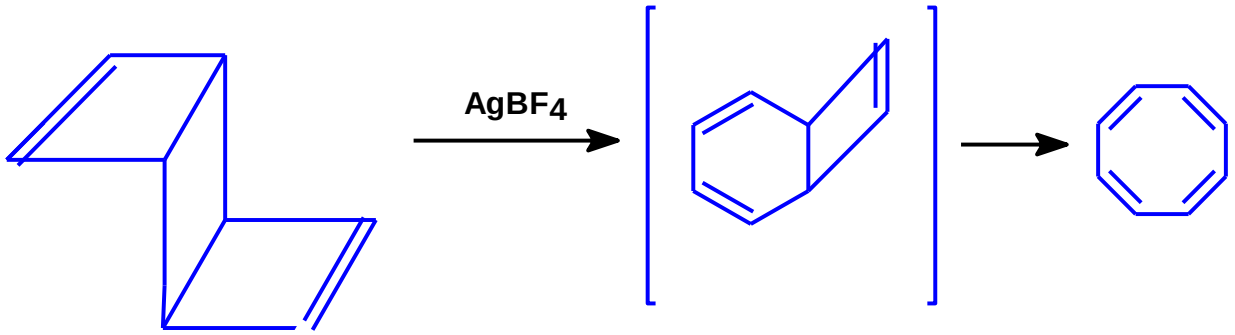
- El **Ciclobutanodieno** es tan inestable que se dimeriza por si mismo a través de una reacción de Diels-Alder a baja temperatura



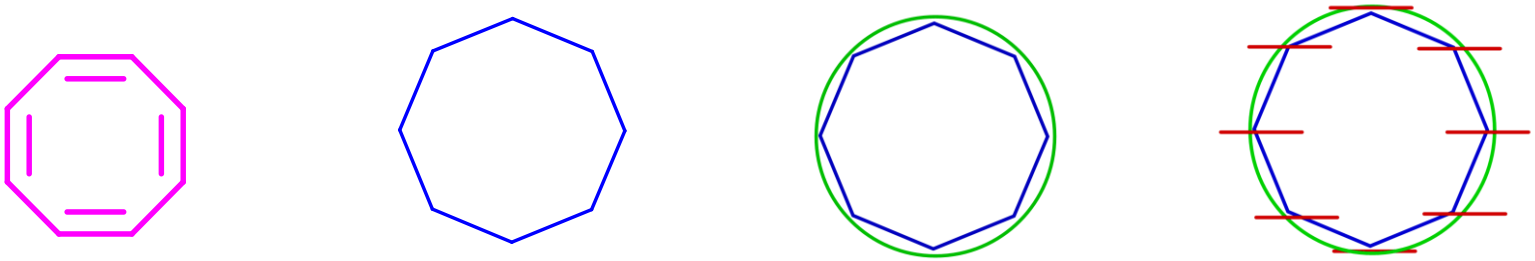
Reacción de Diels-Alder del [4]-anuleno

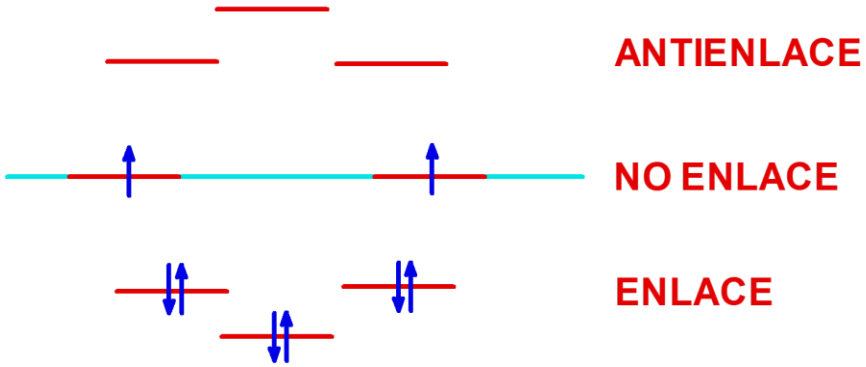


ISOMERIZACIÓN DEL ADUCTO EXO:
OBTENCIÓN DEL [8]-ANULENO

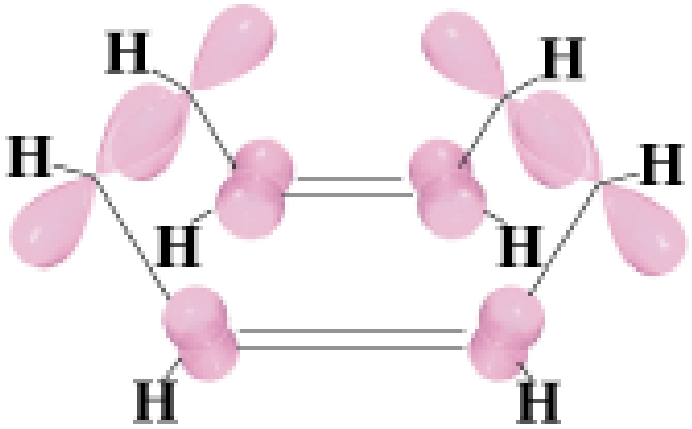


- El **Ciclooctatetraeno** tiene cuatro dobles enlaces, y reacciona con Br_2, $KMnO_4$, y HCl como si este se comportara como cuatro alquenos

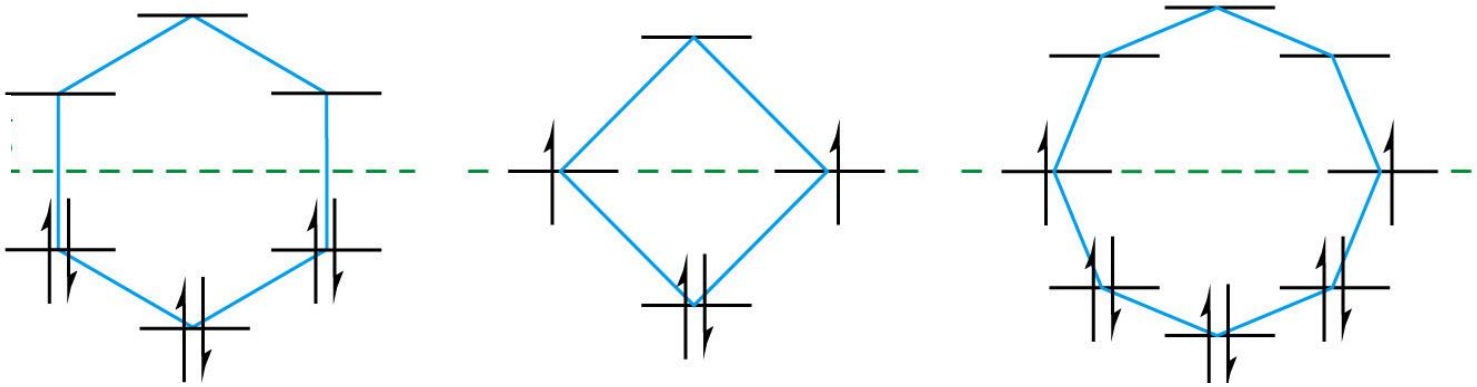




CICLOOCTATETRAENO O [8]-ANULENO



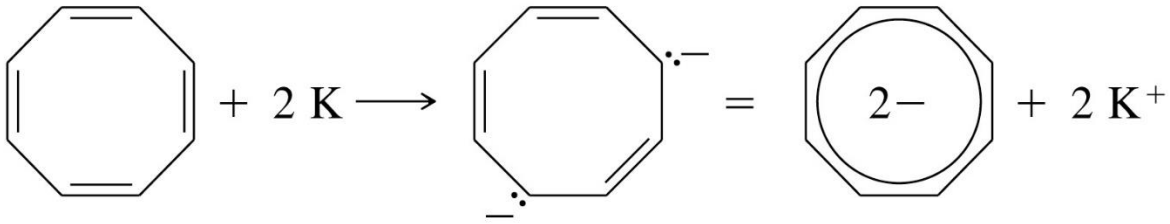
Línea de enlace



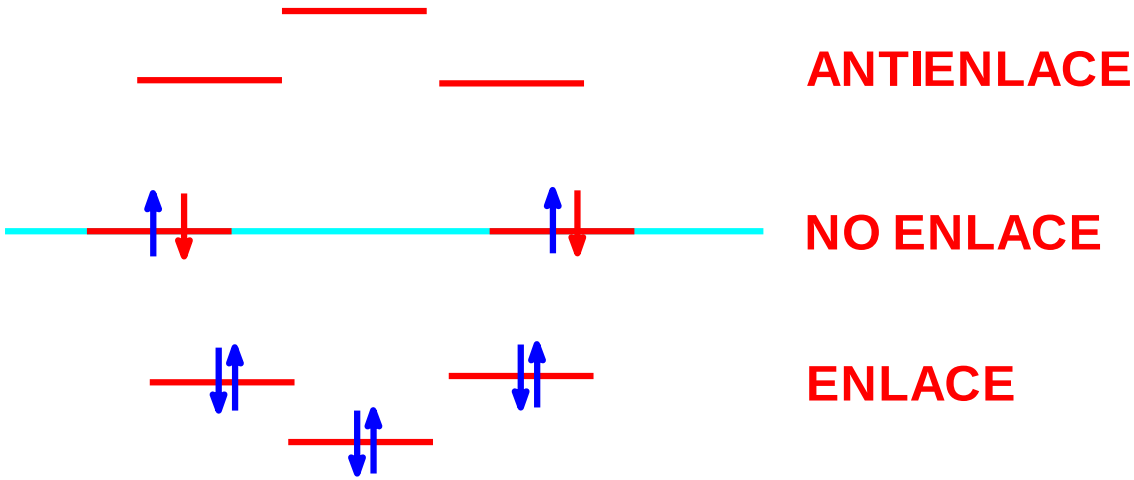
Benceno **Ciclobutanodieno** **Ciclooctanotetraeno**

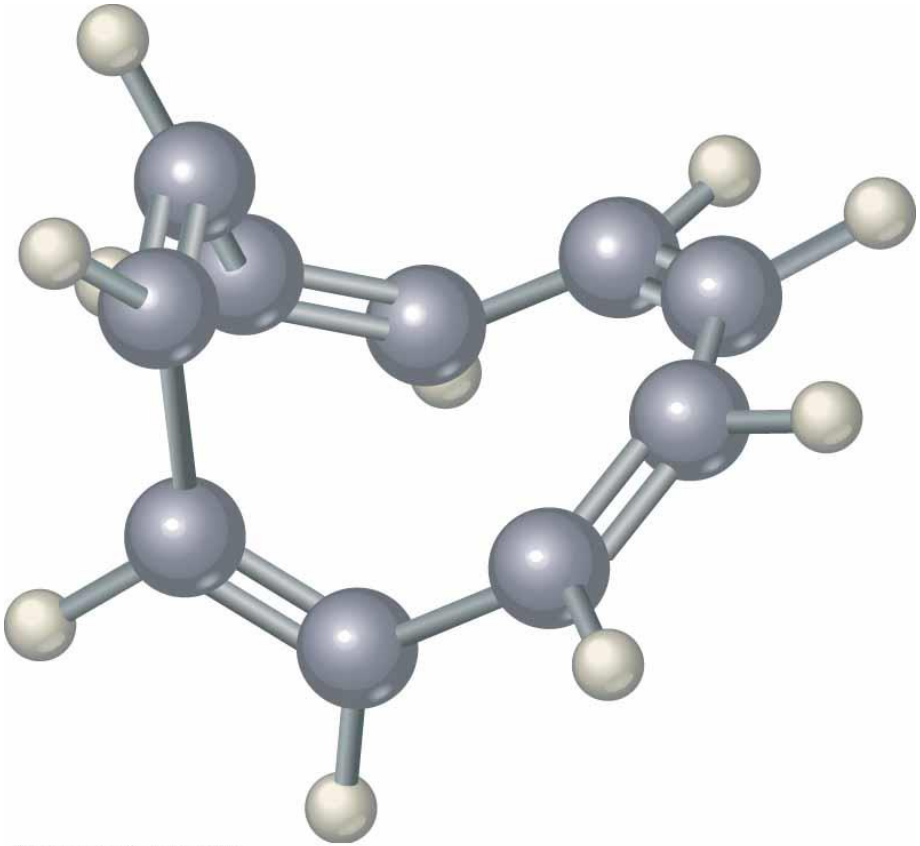
¿Se puede convertir en un intermediario aromático?

¿Se puede convertir en un intermediario aromático?.
Respuesta: si. Reducción parcial de Birch



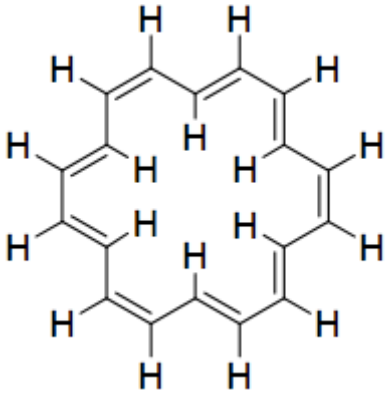
10 electrones π





[10]-anuleno

[18]-anuleno



¿Es aromático?

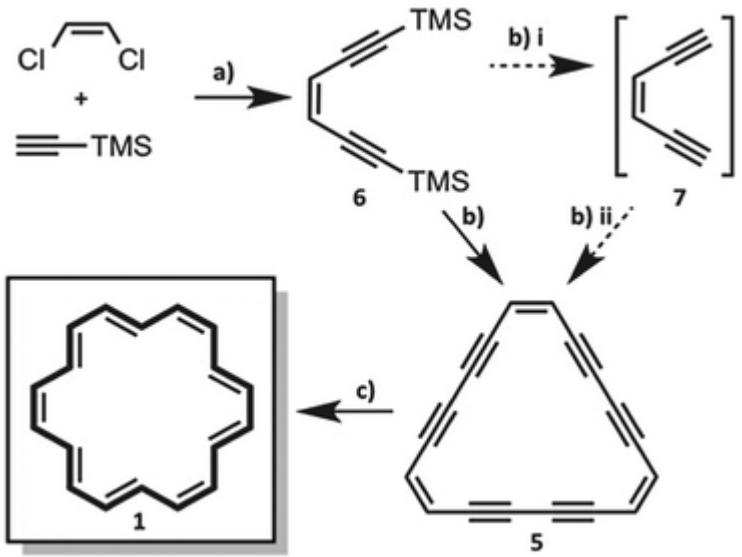
Evidencia física para determinar si un compuesto es aromático

RMN-1H: anisotropía

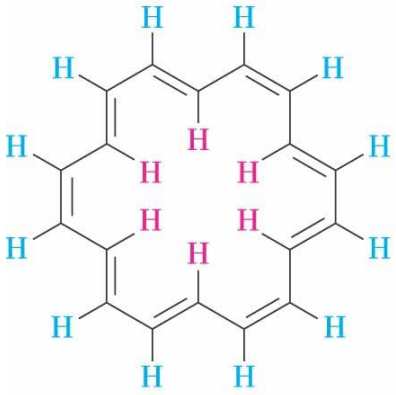
[18]Annulene put into new perspective

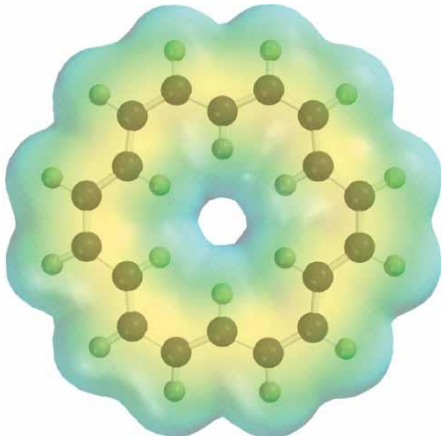
Dominik Lungerich,[a] Alexey V. Nizovtsev,[b] Frank W. Heinemann,[b] Frank Hampel,[a] Karsten Meyer,[b] George Majetich,[c] Paul v. R. Schleyer,[c] and Norbert Jux*[a]

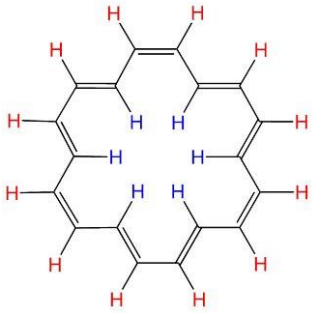
Chem. Commun., **2016**,*52*, 4710-4713

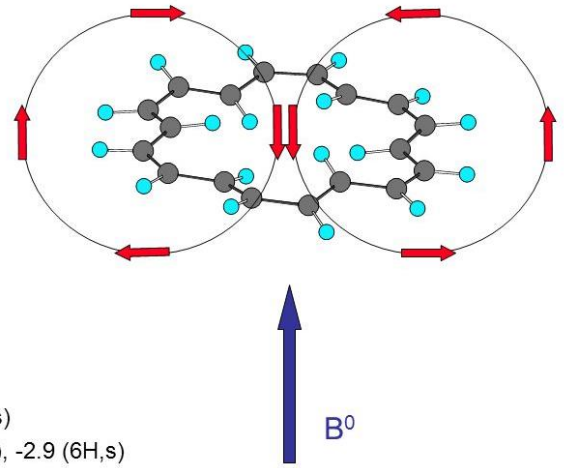


Scheme 1 Improved synthesis of **1** and **5**; (a) 2% $Pd(PPh_3)_2Cl_2$, 4% CuI in benzene/*n*-butylamine, r.t. (90%); (b) (i) 1 M TBAF in THF, 0 °C, (ii) excess $Cu(OAc)_2 \cdot H_2O$ in pyridine, r.t. (24%); (c) 5% $Pd/CaCO_3$/Pb, quinoline, 1 atm H_2 in benzene, r.t. (20%).









18 electrones π

H internos: - 3.0 δ

H externos: 9.3 δ

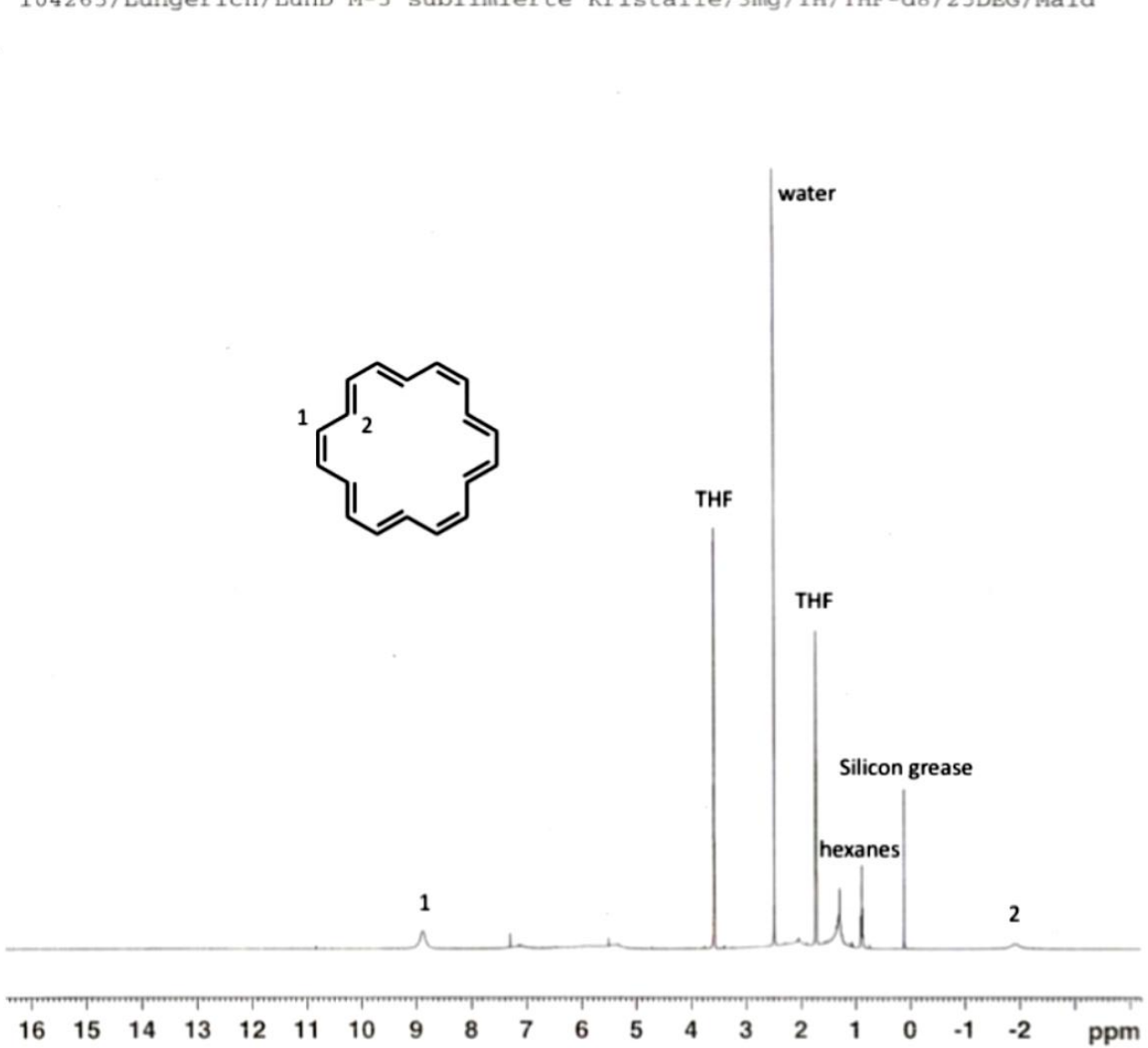
^{1}H NMR:

120^{O}C; δ5.45 (18H,s)

-60^{o}C; δ9.25 (12H,s), -2.9 (6H,s)

B^0

Fig. S16 ^{1}H NMR of sublimed **1** in THF-D_8 at rt (400 MHz); crystals were carefully washed with hexanes, CH_2Cl_2, benzene and




```
Current Data Parameters
NAME                 41u104265
EXPNO                        1
PROCNO                       1

F2 - Acquisition Parameters
Date_                 20151218
Time                     13.06
INSTRUM                  spect
PROBHD     5 mm PABBO BB-
PULPROG                  zg30
TD                      65536
SOLVENT                   THF
NS                         32
DS                          2
SWH                  8278.146 Hz
FIDRES               0.126314 Hz
AQ                   3.9583745 sec
RG                       228.1
DW                      60.400 use
DE                       9.00 use
TE                      298.4 K
D1                   2.00000000 sec
TD0                          1

======== CHANNEL f1 =======
NUC1                        1H
P1                       12.13 use
PL1        0 dB
SFO1              400.1324710 MHz

F2 - Processing parameters
SI                       32768
SF                400.1300143 MHz
WDW                         EM
SSB        0
LB                       0.30 Hz
GB         0
PC                       1.00
```

Fig. S17 Zoom-in of ^{1}H NMR of **1** in THF-D_8 at rt (400 MHz).

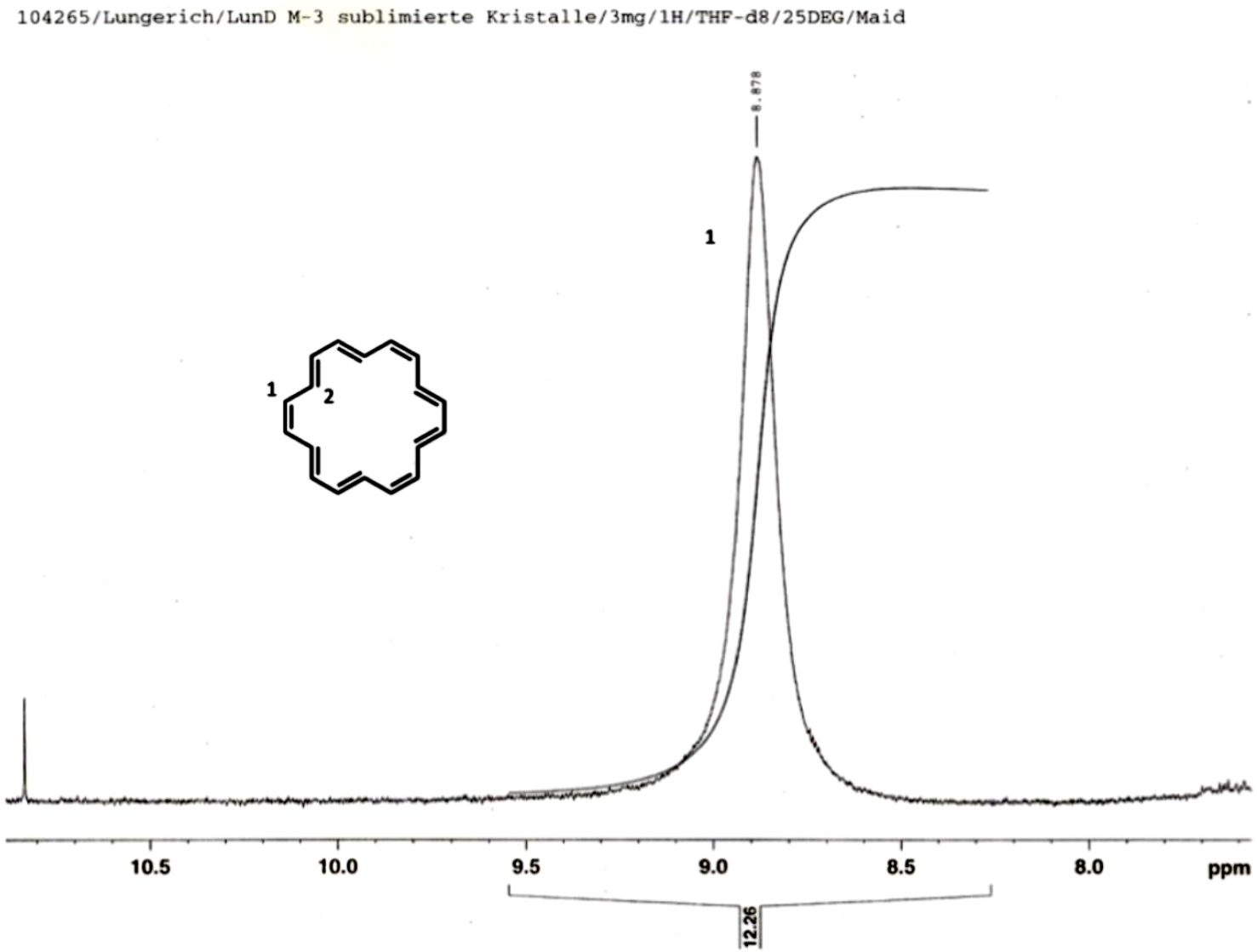
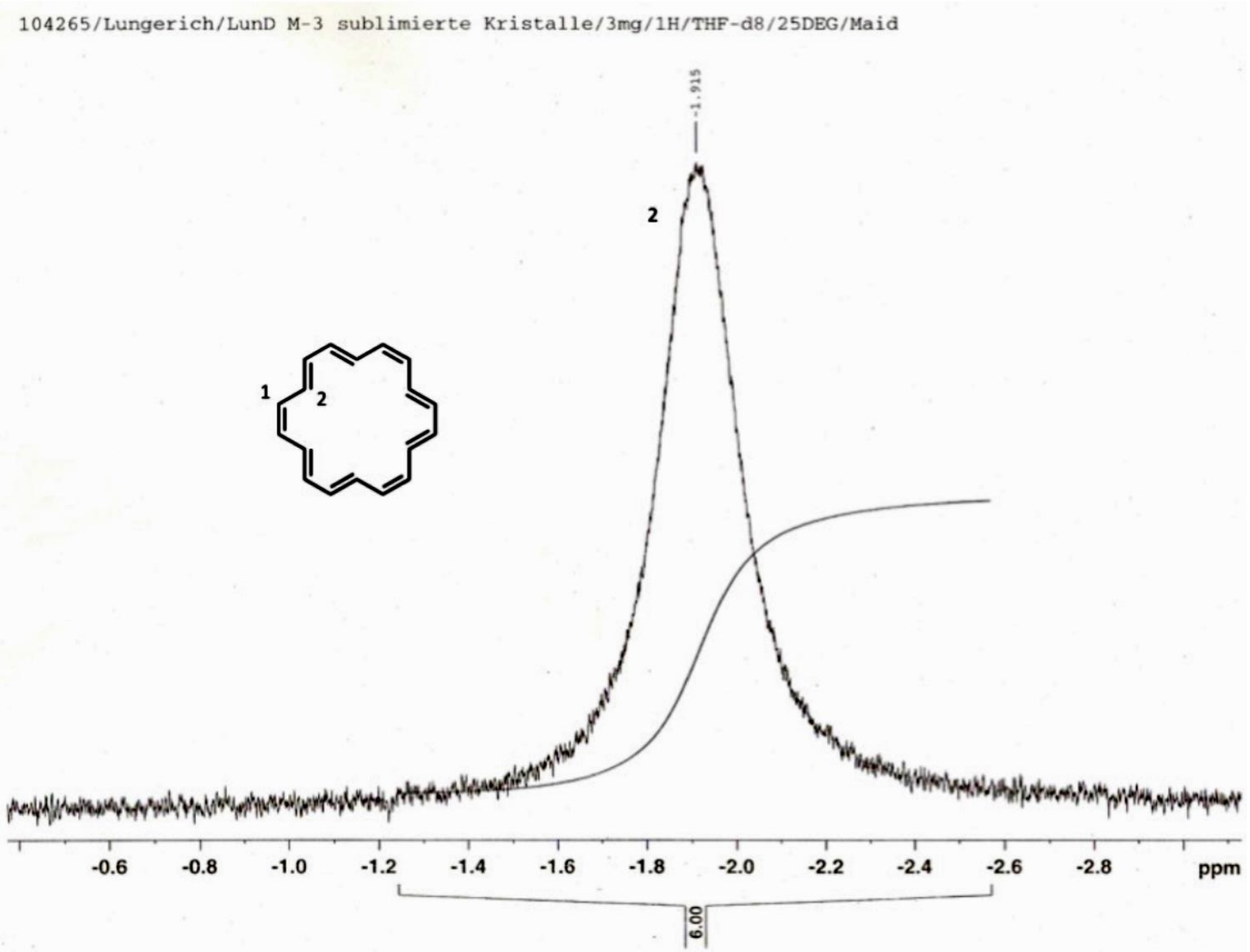
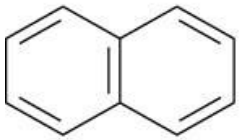


Fig. S18 Zoom-in of ^{1}H NMR of **1** in THF-D_8 at rt (400 MHz).

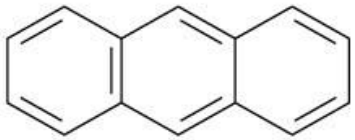


COMPUESTOS POLICÍCLICOS AROMÁTICOS: NAFTALENO

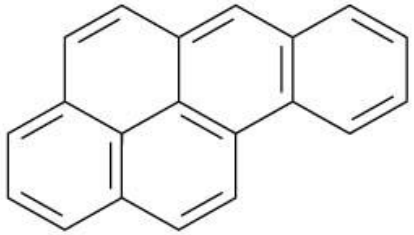
- Los compuestos aromáticos pueden tener anillos que comparten una serie de átomos de carbono (anillos fusionados)
- Los compuestos que se forman por la fusión de benceno o anillos heterocíclicos aromáticos, también son aromáticos



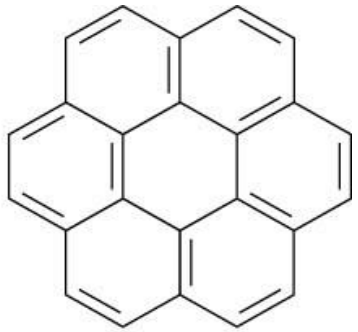
Naftaleno



Antraceno



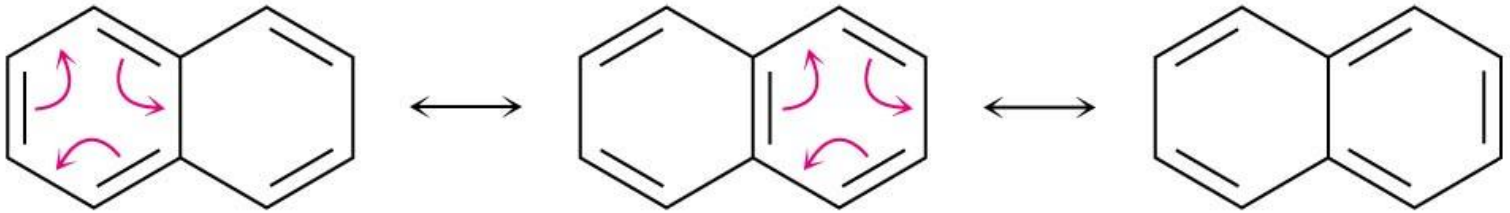
Benzo[a]pireno

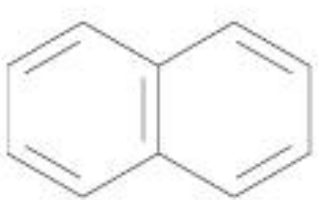


Coroneno

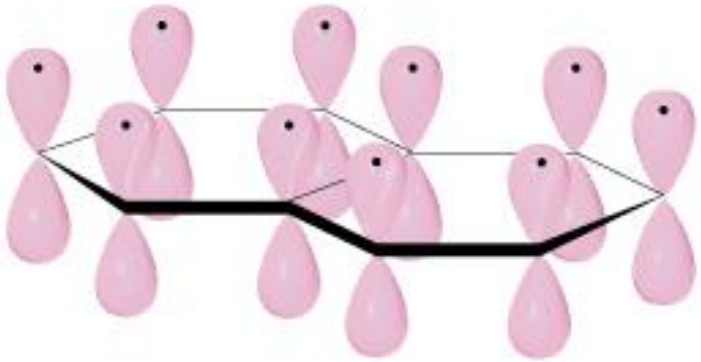
ORBITALES DEL NAFTALENO

- Hay tres formas resonantes en las que se encuentran los electrones deslocalizados



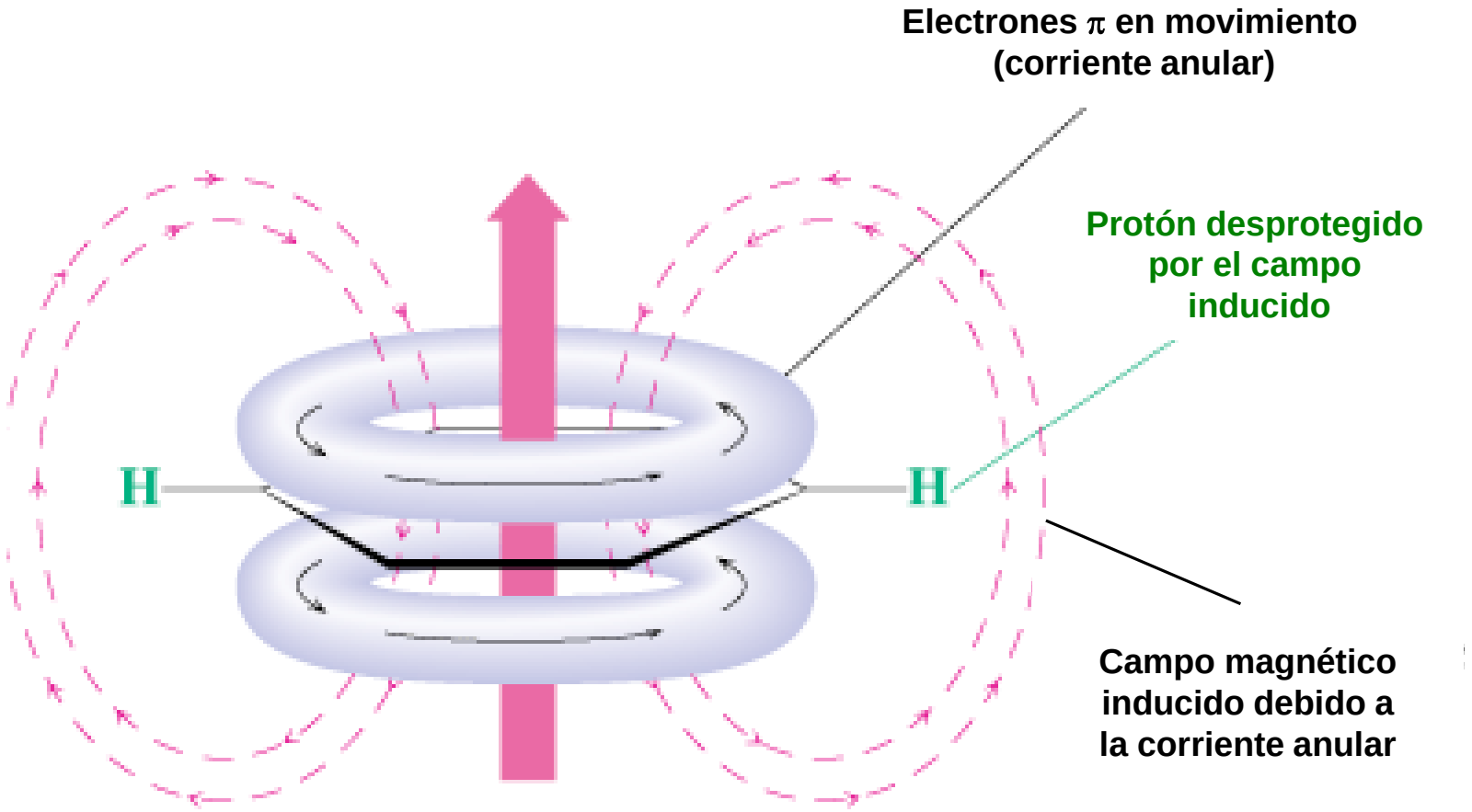


Naftaleno

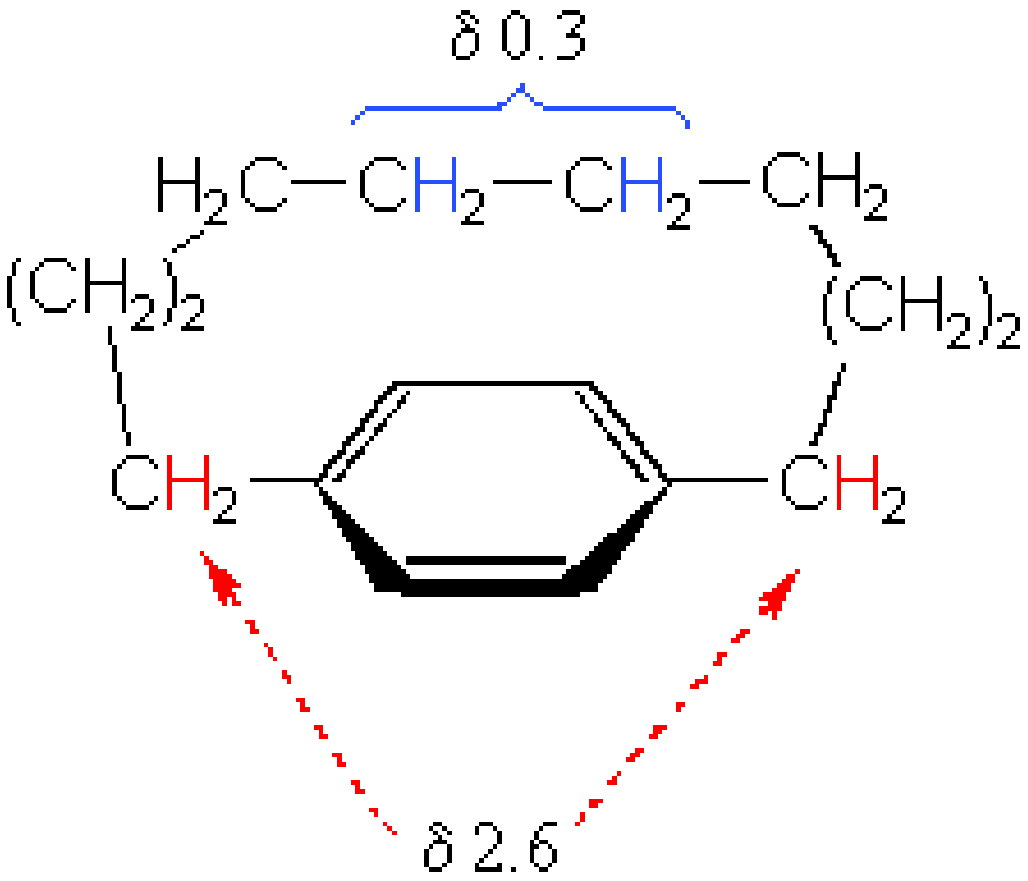


CORRIENTES DE ELECTRÓNES

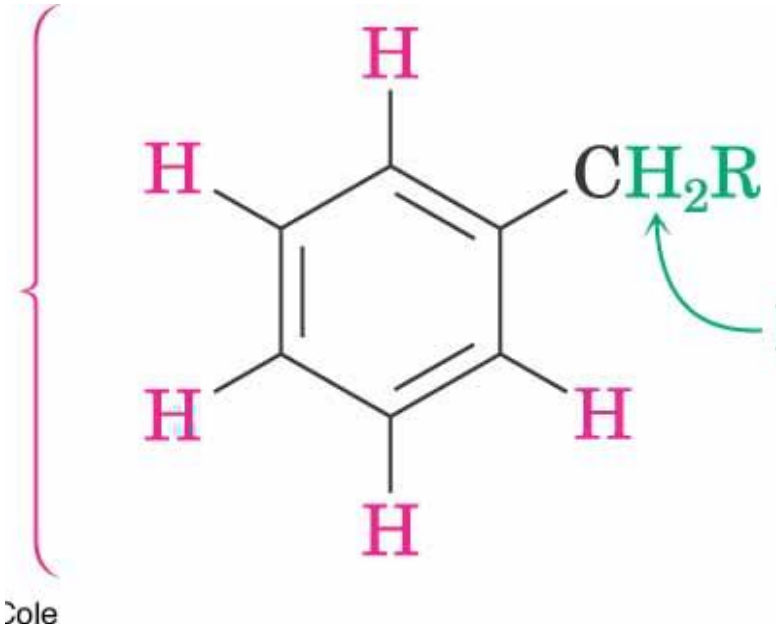
- Cuando el anillo aromático se orienta perpendicularmente a un campo magnético fuerte, los electrones π deslocalizados producen un pequeño campo magnético local
  - El campo magnético aplicado se ***opone*** en la mitad del anillo, pero ***refuerza*** el campo magnético externo aplicado por afuera del anillo
  - Esto da como resultado que los hidrógenos entran en resonancia a **campos más bajos**


Electrones π en movimiento
(corriente anular)
Protón desprotegido
por el campo
inducido
H
H
Campo magnético
inducido debido a
la corriente anular
CAMPO MAGNÉTICO APLICADO

Resonancia magnética nuclear de protón: RMN-^{1}H

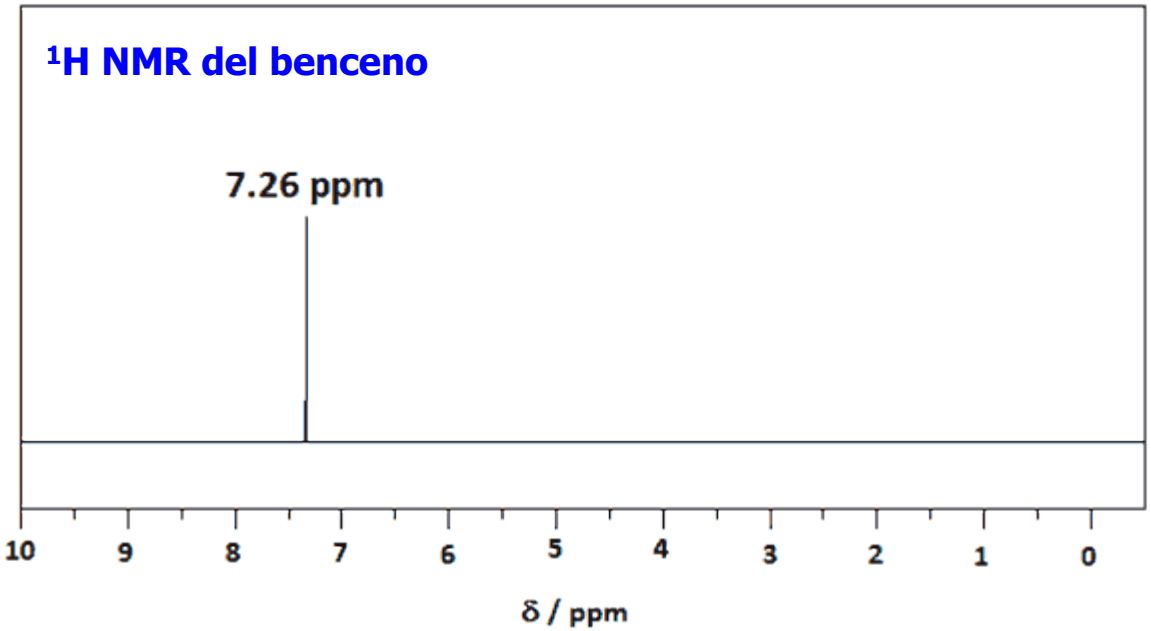


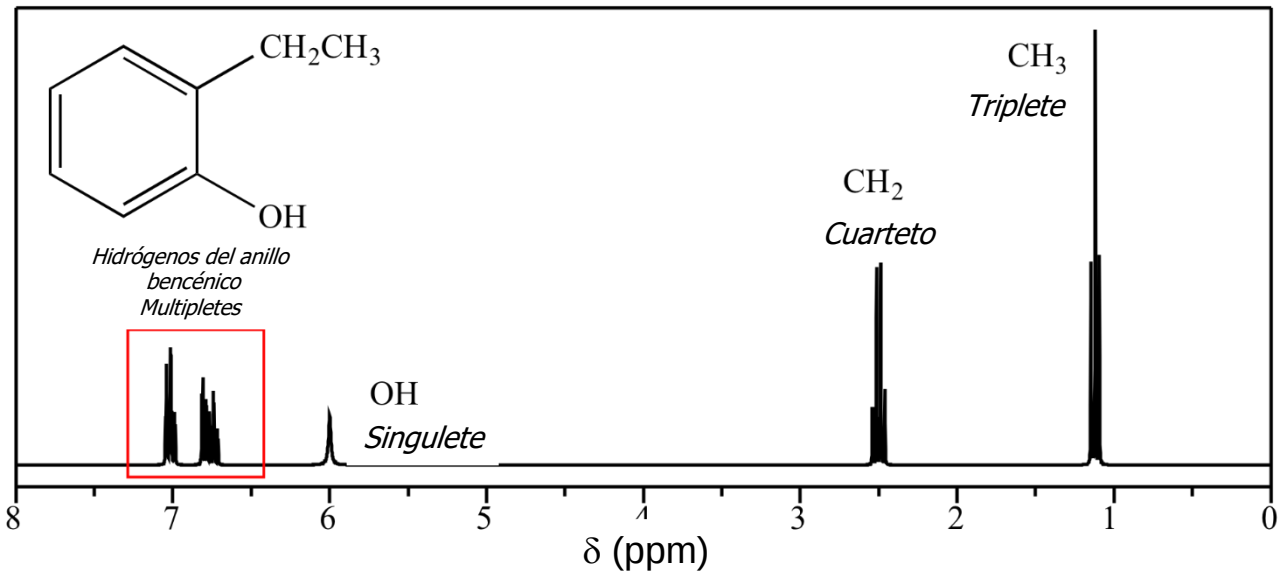
H arílicos, 6.5-8.0 δ

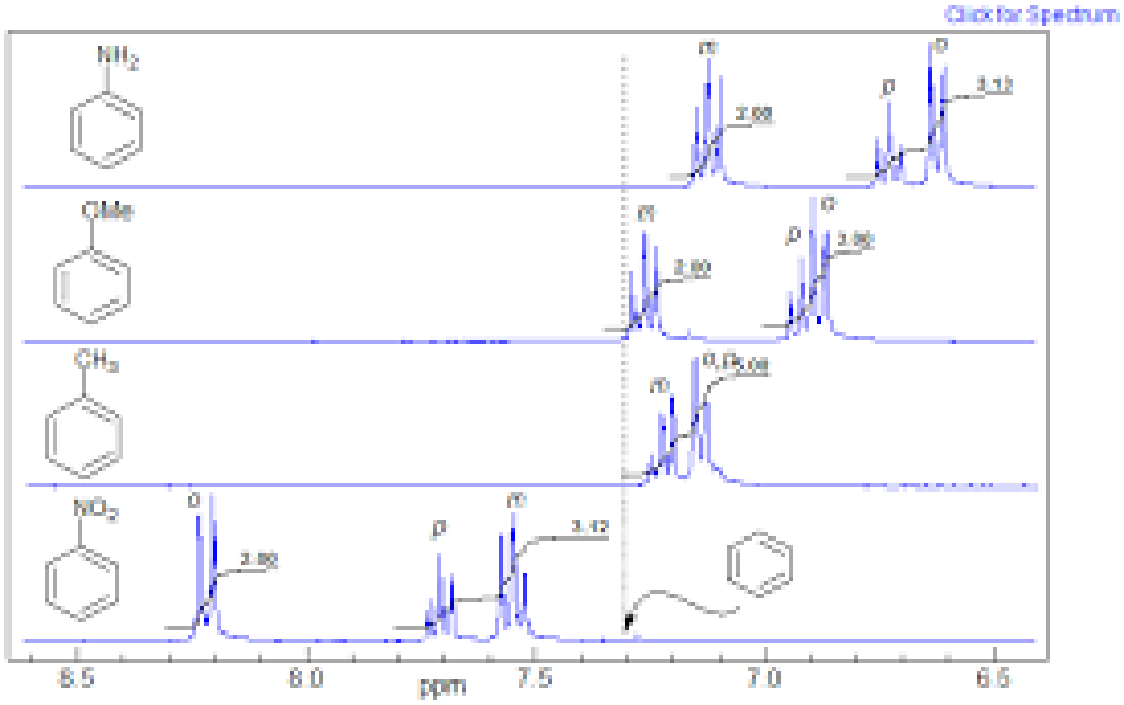


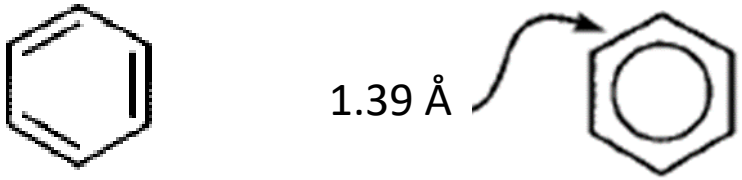
Hidrógenos bencílicos δ 2.3-3.0

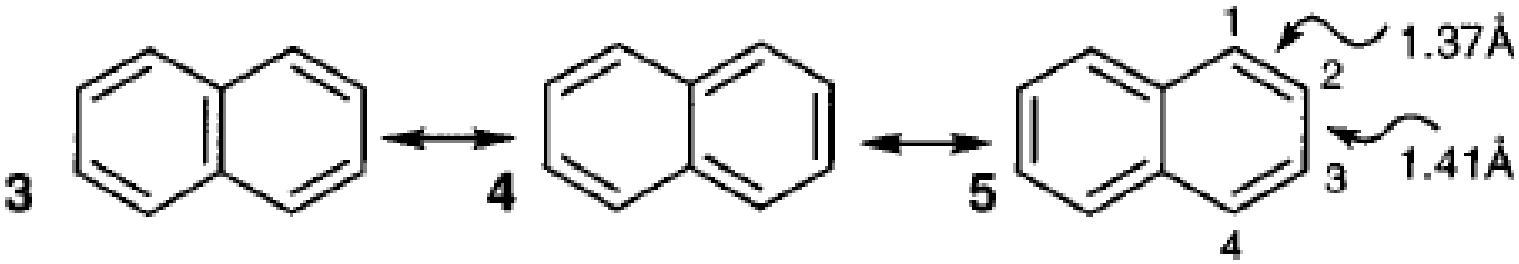
^{1}H NMR del benceno

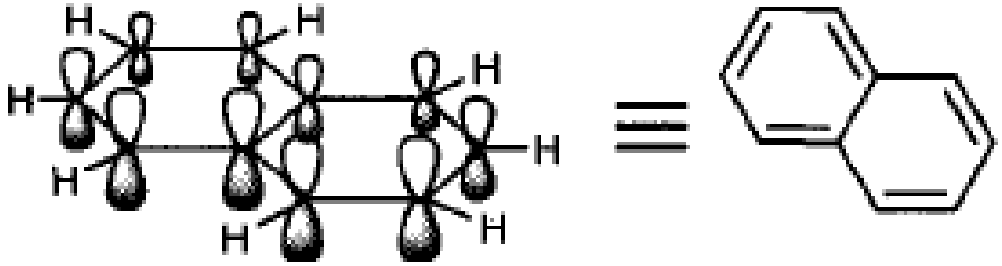




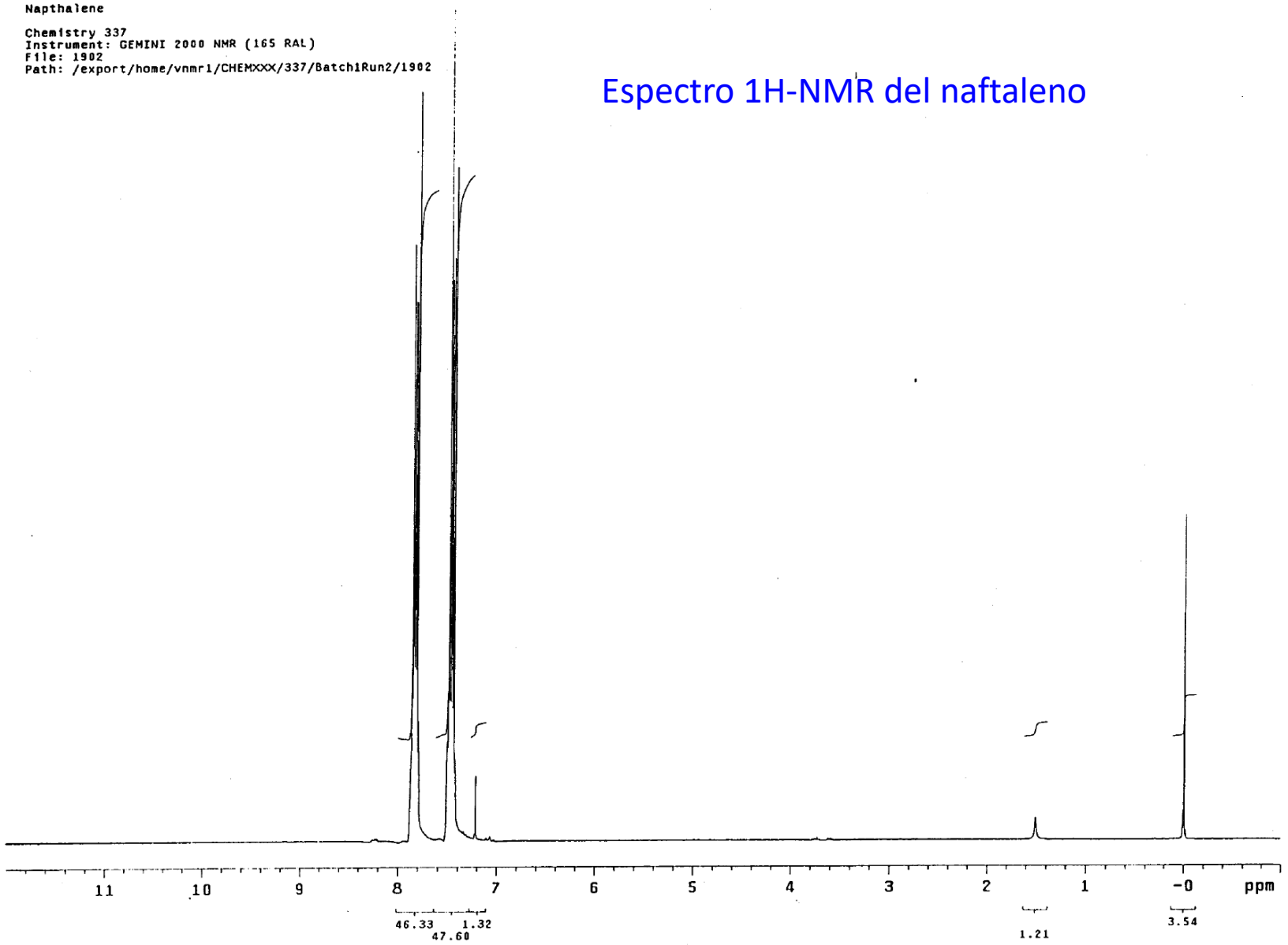

Click for Spectrum
NH2
m
o
p
2.68
3.13
OMe
m
o
p
2.80
2.98
CH3
m
o,p
5.08
NO2
o
p
m
2.88
3.42
8.5
8.0
7.5
7.0
6.5
ppm


1.39 Å


3
4
5
1
2
3
4
1.37Å
1.41Å

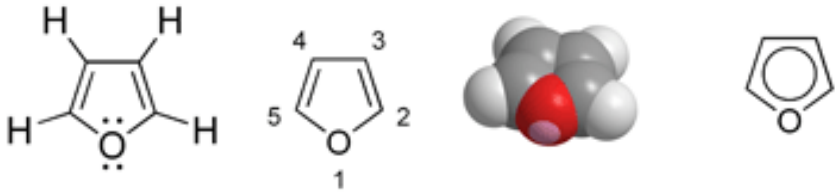

H
H
H
H
H
H
H
H

Espectro 1H-NMR del naftaleno

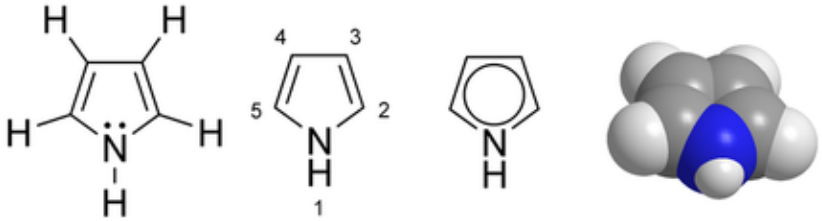


ANILOS HETEROCÍCLICOS

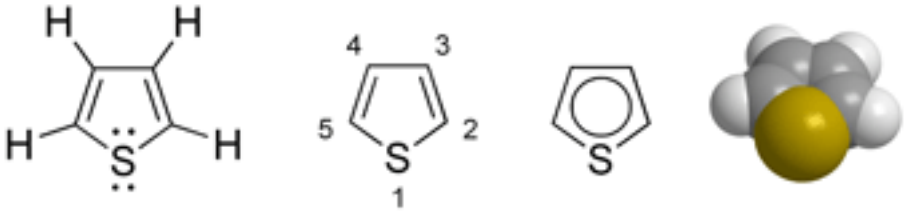
FURANO



PIRROL



TIOFENO



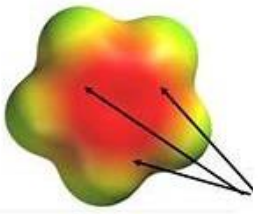
ANIÓN CICLOPENDADIENILO

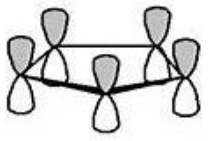
https://www.youtube.com/watch?v=S7FRX9pRjYQ

CICLOPENTADIENO

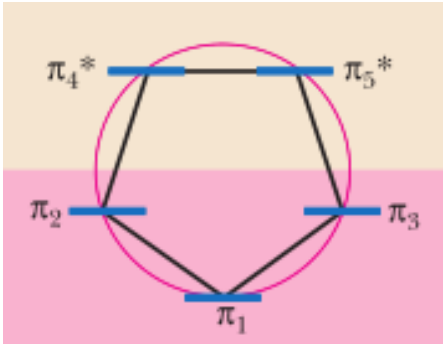
4 electrones π
Dieno
conjugado

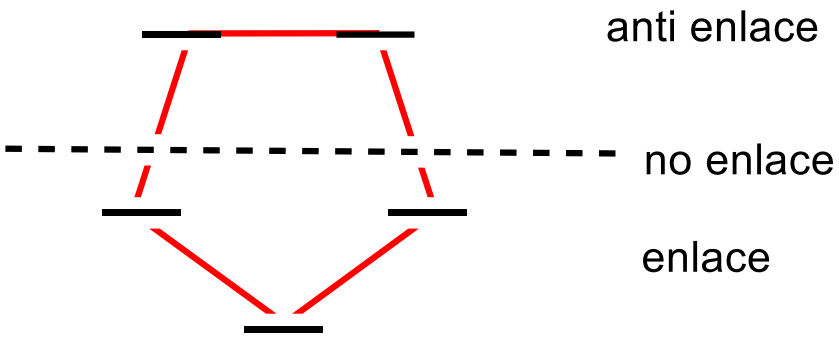
¿Es aromático?

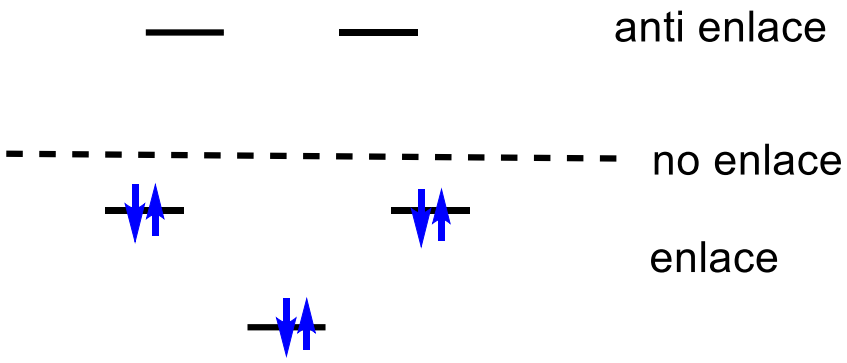




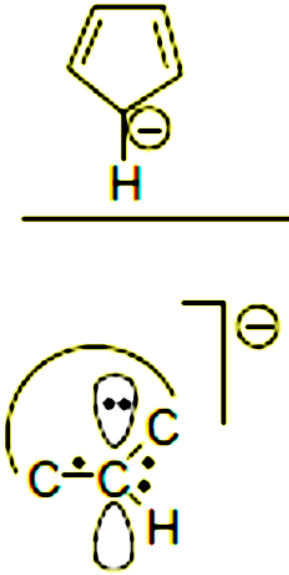
Carga distribuída
equitativamente


π_4^*
π_5^*
π_2
π_3
π_1

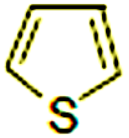

anti enlace
no enlace
enlace


anti enlace
no enlace
enlace

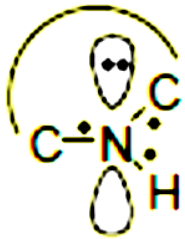
Tanto pirrol, furano y tiofeno son considerados isoelectrónicos con el anión del ciclopentanodieno



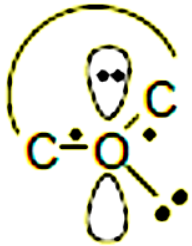
≡



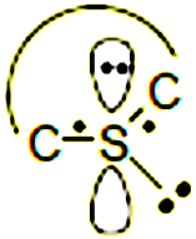
CH:$^{-}$ con hidribación sp^2



NH: con hidribación sp^2

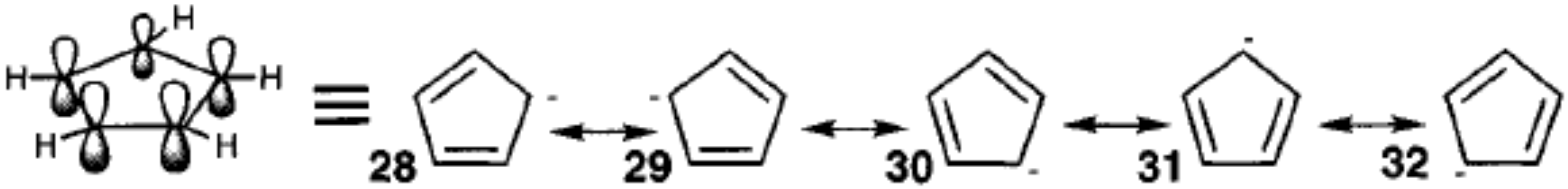


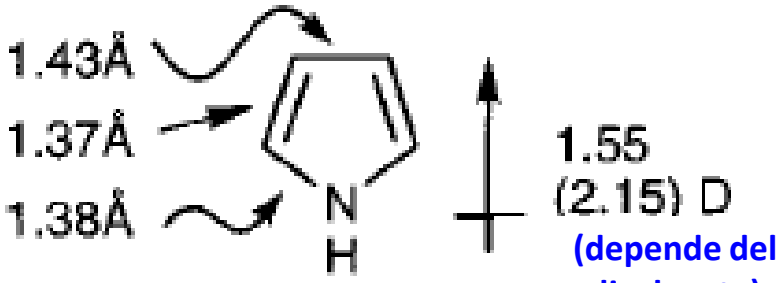
O: con hidribación sp^2



S: con hidribación sp^2

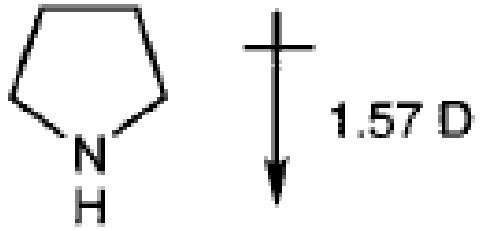
Anión ciclopentadienilo



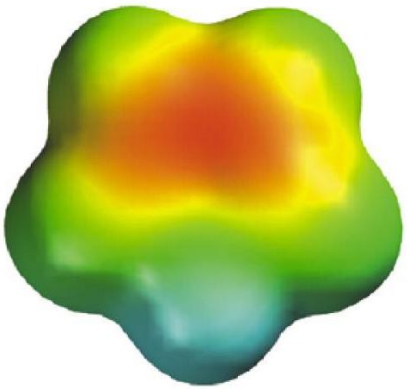


(depende del disolvente)

Pirrol

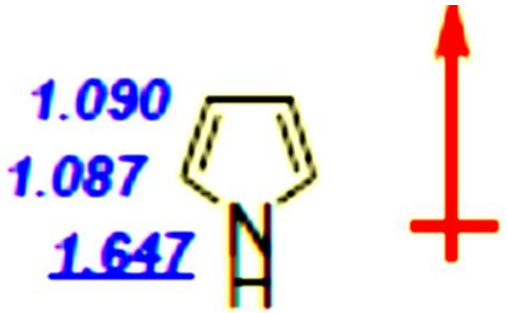


Pirrolidina



Color azul: densidad electrónica
Color rojo: momentos dipolo

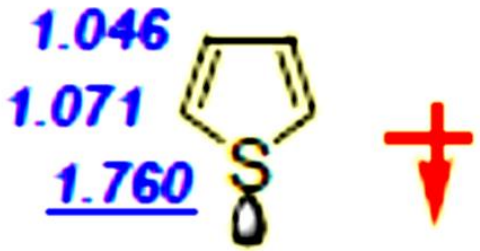
Más rico en electrones en C-5



1.5 – 2.15 D
El momento dipolo depende del disolvente

Menos rico en electrones en C-5

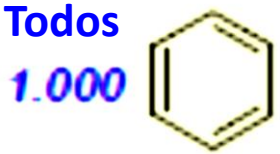
0.72 D



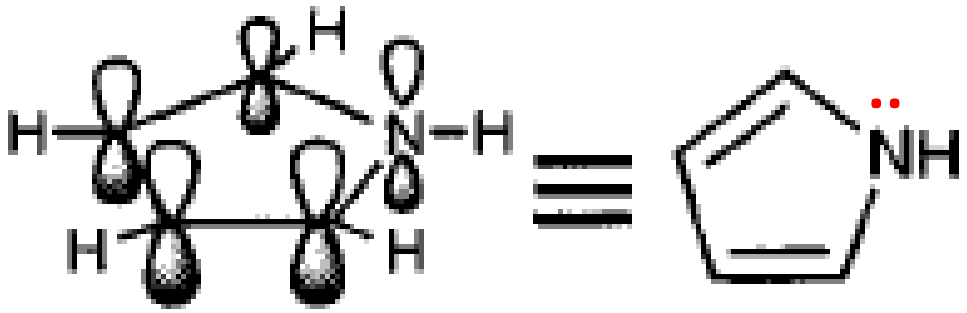
0.52 D

El momento dipolo esta determinado por el par de electrones libres sp^2

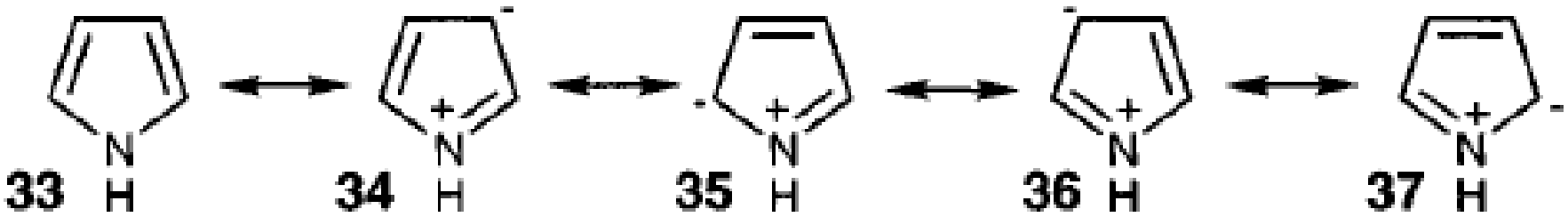
Todos



0 D



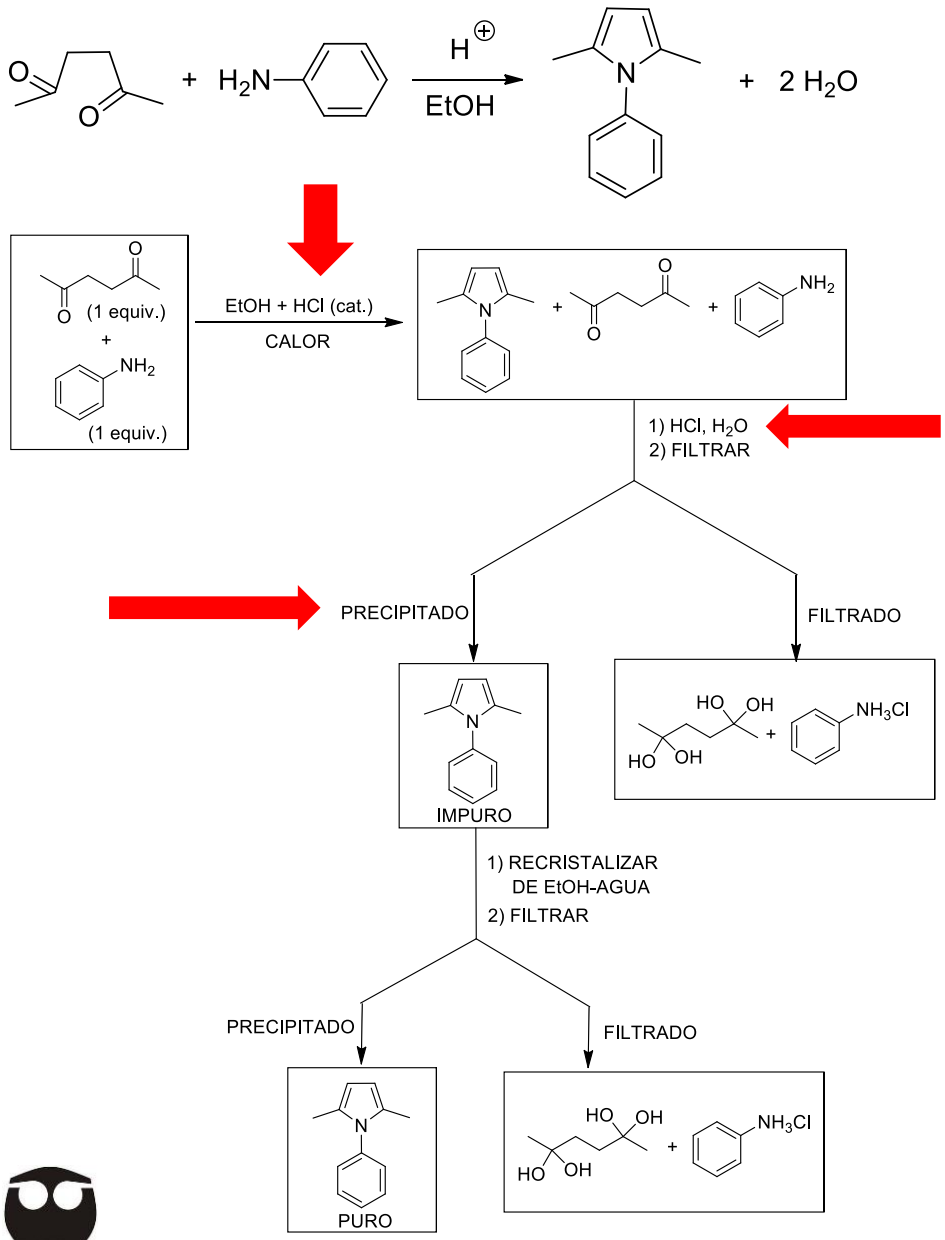
Pirrol

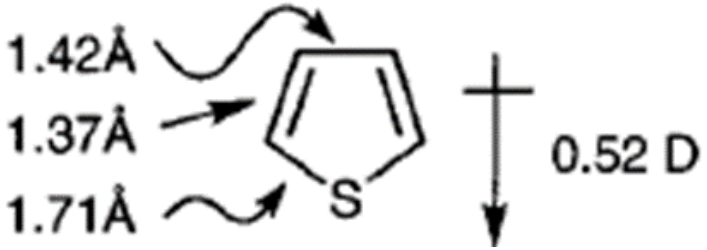


Orden de importancia: $33 > 35,37 > 34,36.$

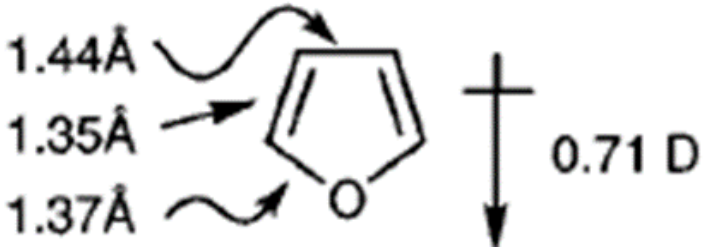
Si las aminas son básicas, ¿el pirrol es una base?

Síntesis de Paal-Knorr para obtener pirroles

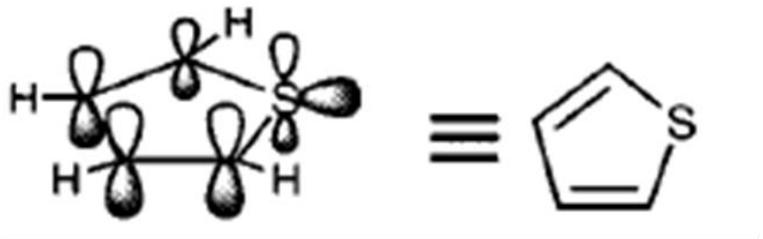




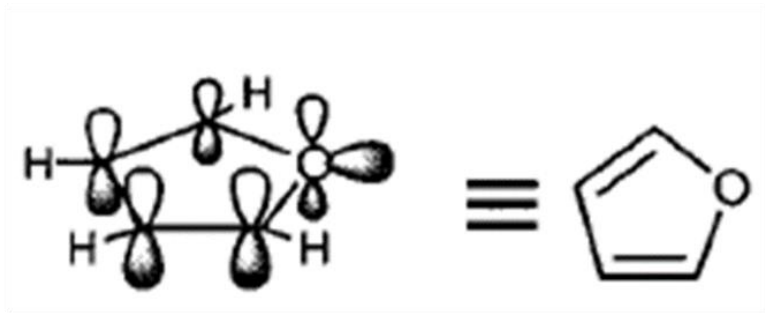
Tiofeno



Furano



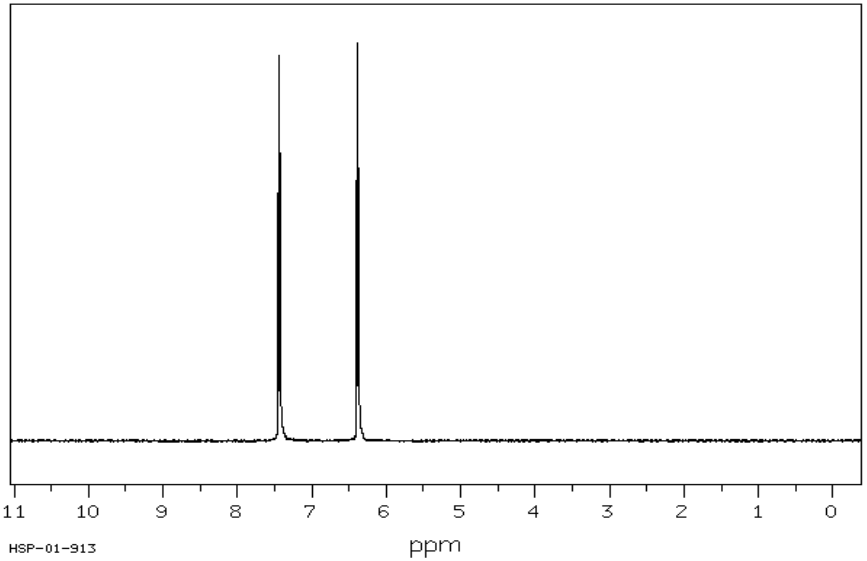
Tiofeno

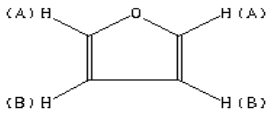


Furano

89.56 MHz

0.04 ml : 0.5 ml $CDCl_3$



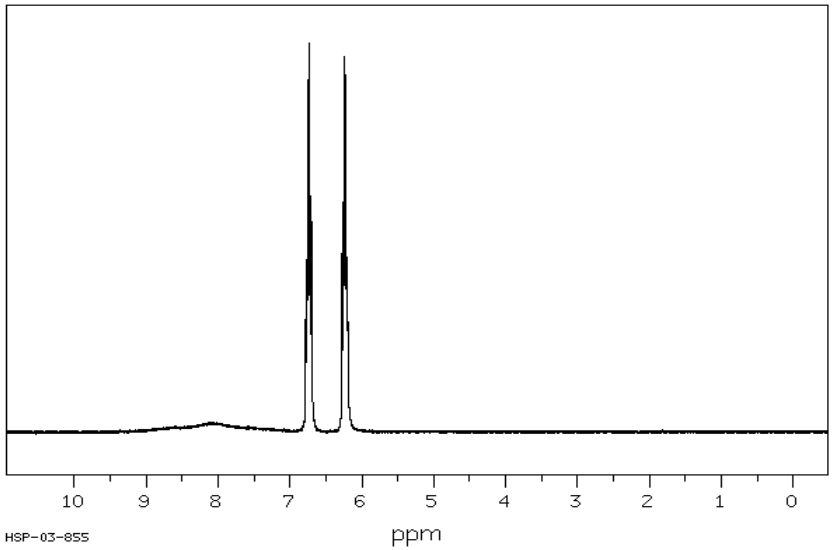


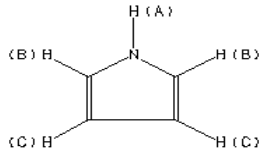
标记氢	化学位移(ppm)
A	7.435
B	6.380

https://www.chemicalbook.com/SpectrumEN_109-97-7_1HNMR.htm

89.56 MHz

0.04 ml : 0.5 ml $CDCl_3$





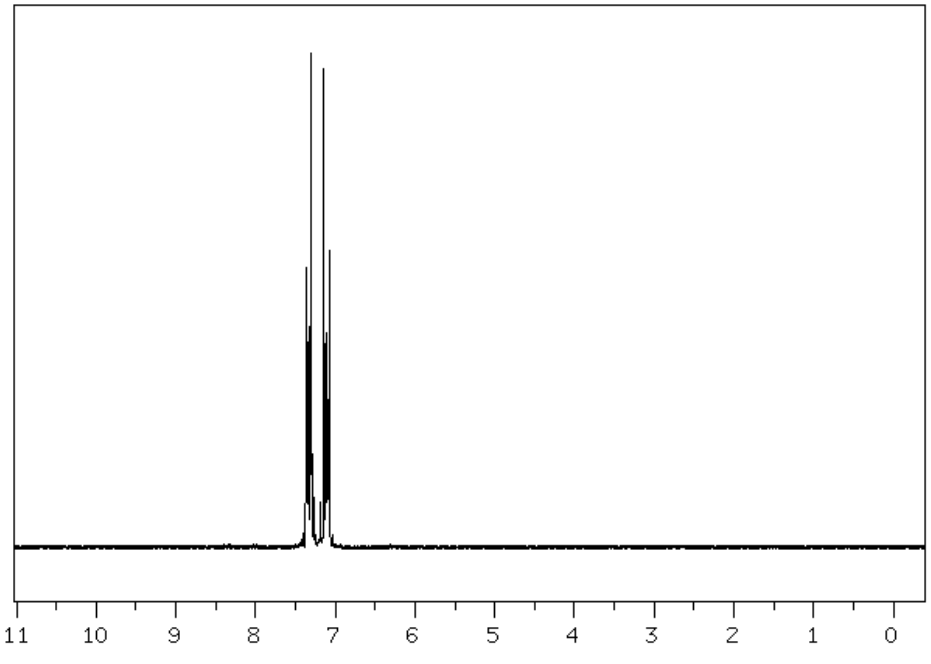
标记氢	化学位移(ppm)
A	8.
B	6.737
C	6.235

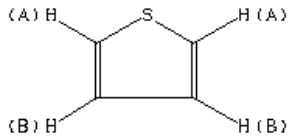
Hz	ppm	Int.

https://www.chemicalbook.com/SpectrumEN_109-97-7_1HNMR.htm

89.56 MHz

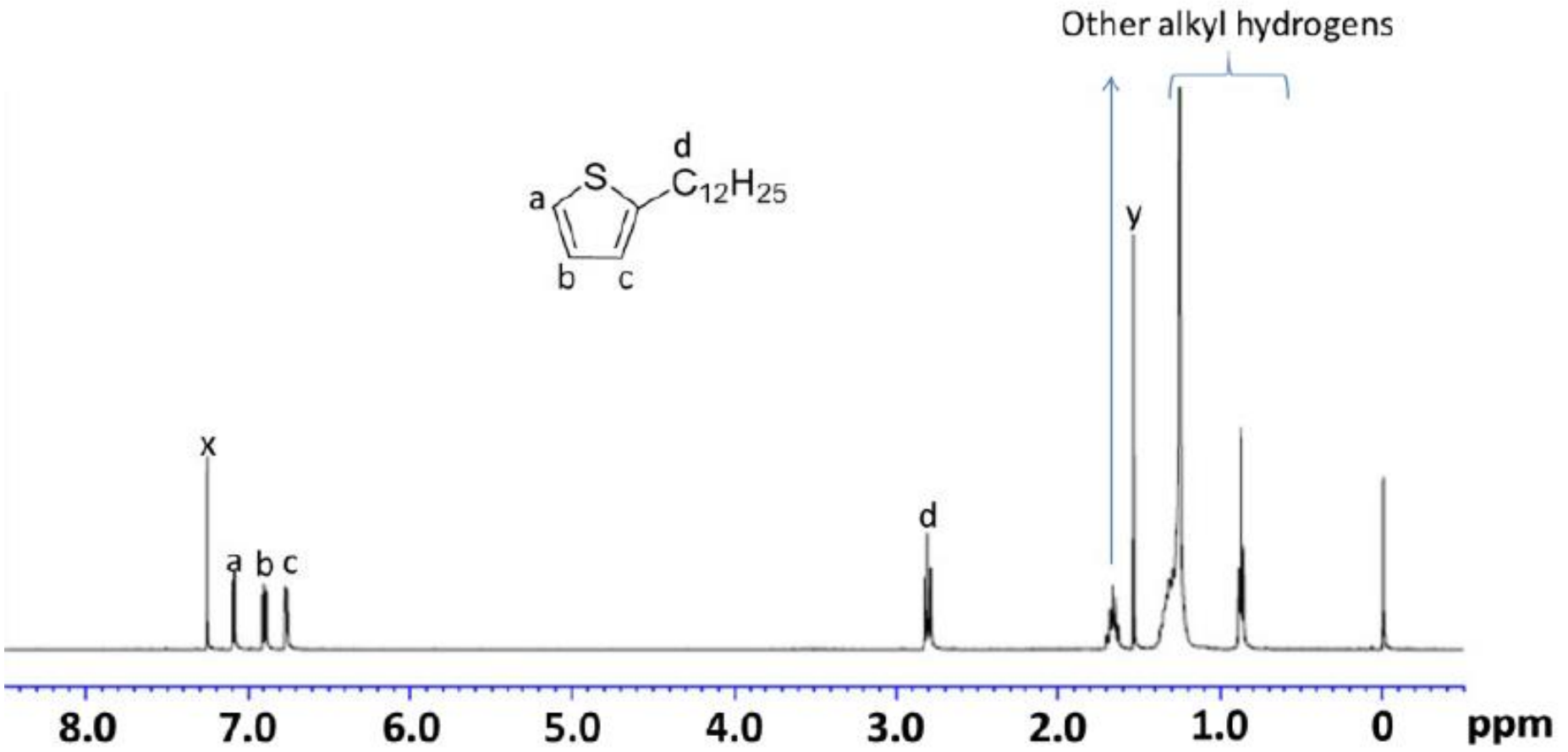
0.04 ml : 0.5 ml $CDCl_3$



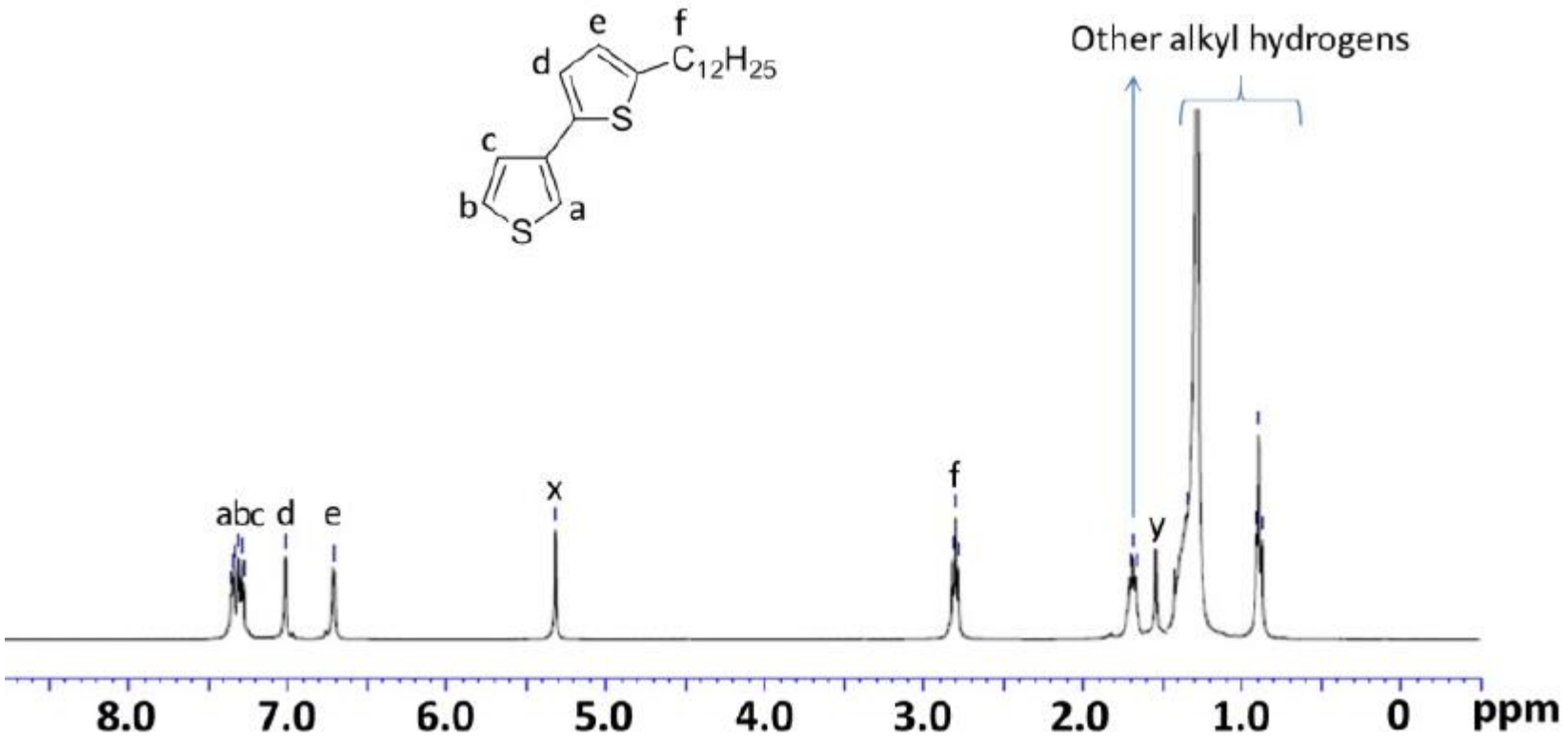


标记氢	化学位移(ppm)
A	7.327
B	7.116

https://www.chemicalbook.com/SpectrumEN_110-02-1_1HNMR.htm



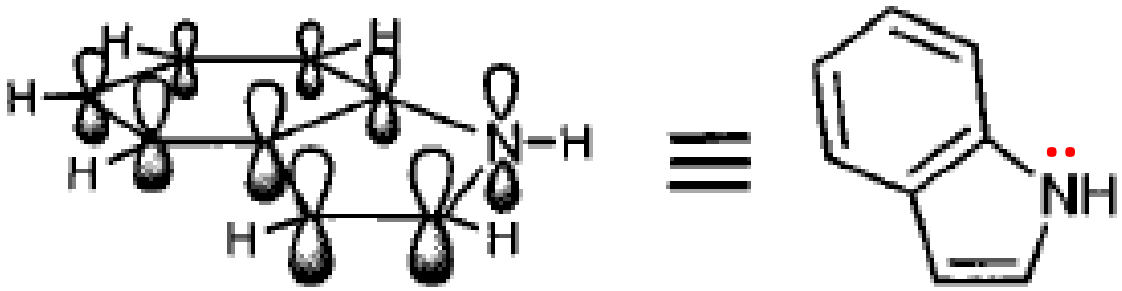
https://www.researchgate.net/figure/Fig-S1-1-H-NMR-Spectrum-of-2-dodecylthiophene-in-CDCl-3-x-CDCl-3-y-H-2-O_fig1_273957668

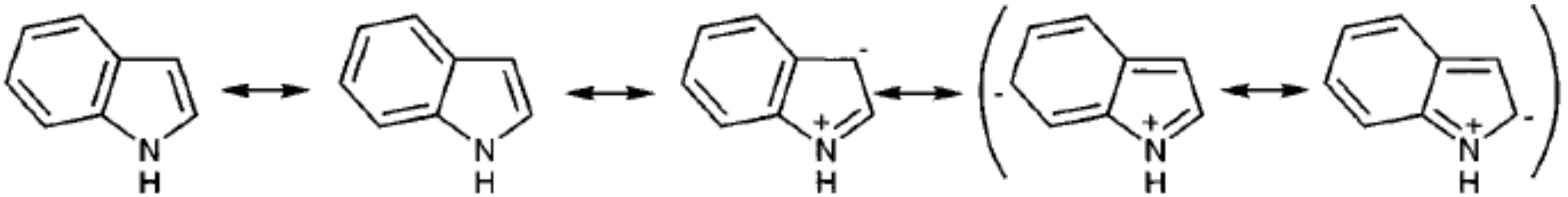


1 H-NMR Spectrum of 5'-dodecyl-3,2'-bithiophene in CD_2Cl_2

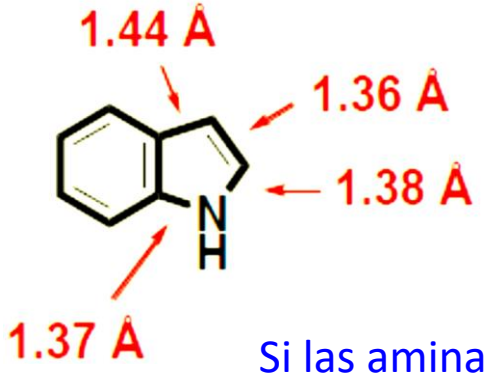
https://www.researchgate.net/figure/Fig-S3-1-H-NMR-Spectrum-of-5-dodecyl-3-2-bithiophene-in-CD-2-Cl-2-x-CD-2-Cl-2_fig3_273957668

Indol





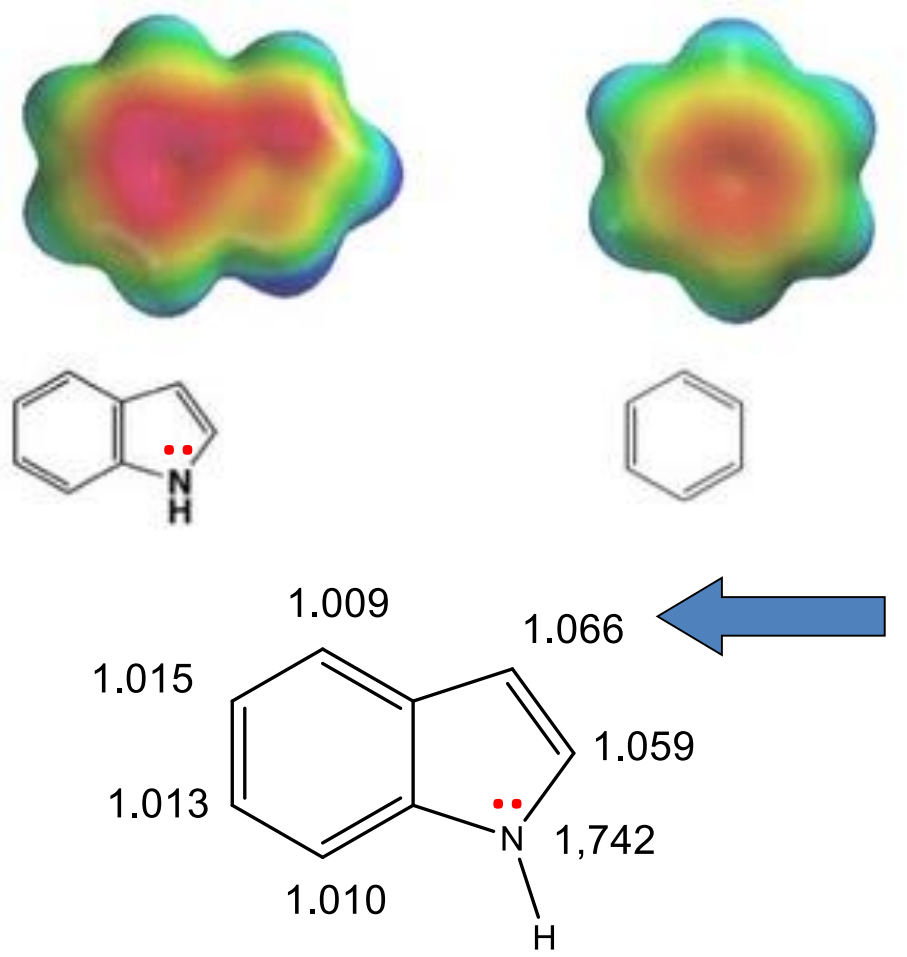
Longitudes de enlace



cf. ave C-C 1.48 Å
ave C=C 1.34 Å
ave C-N 1.45 Å

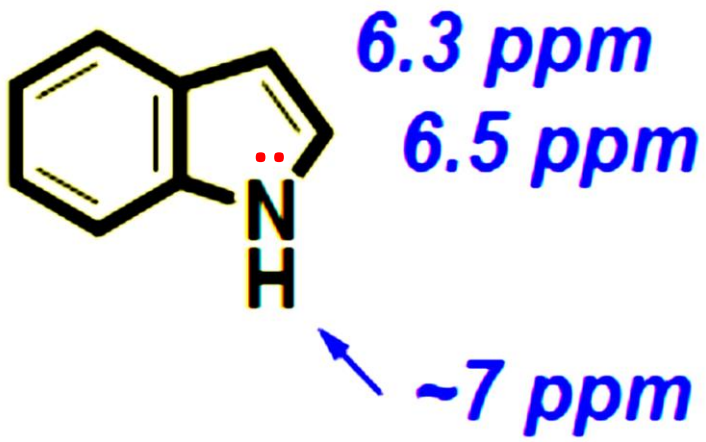
Si las aminas son básicas, ¿el indol es una base?

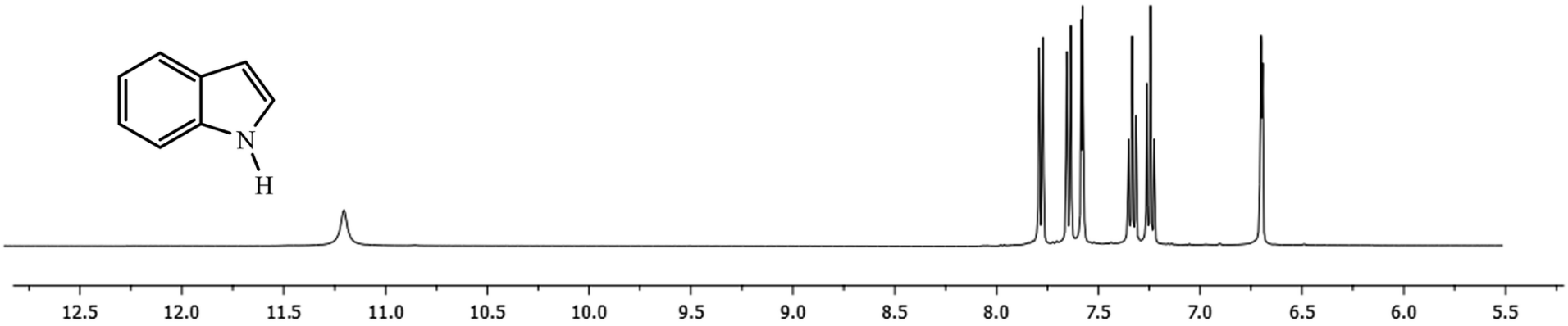
Densidades electrónicas por LCAO-MO con parámetros auxiliares inductivos



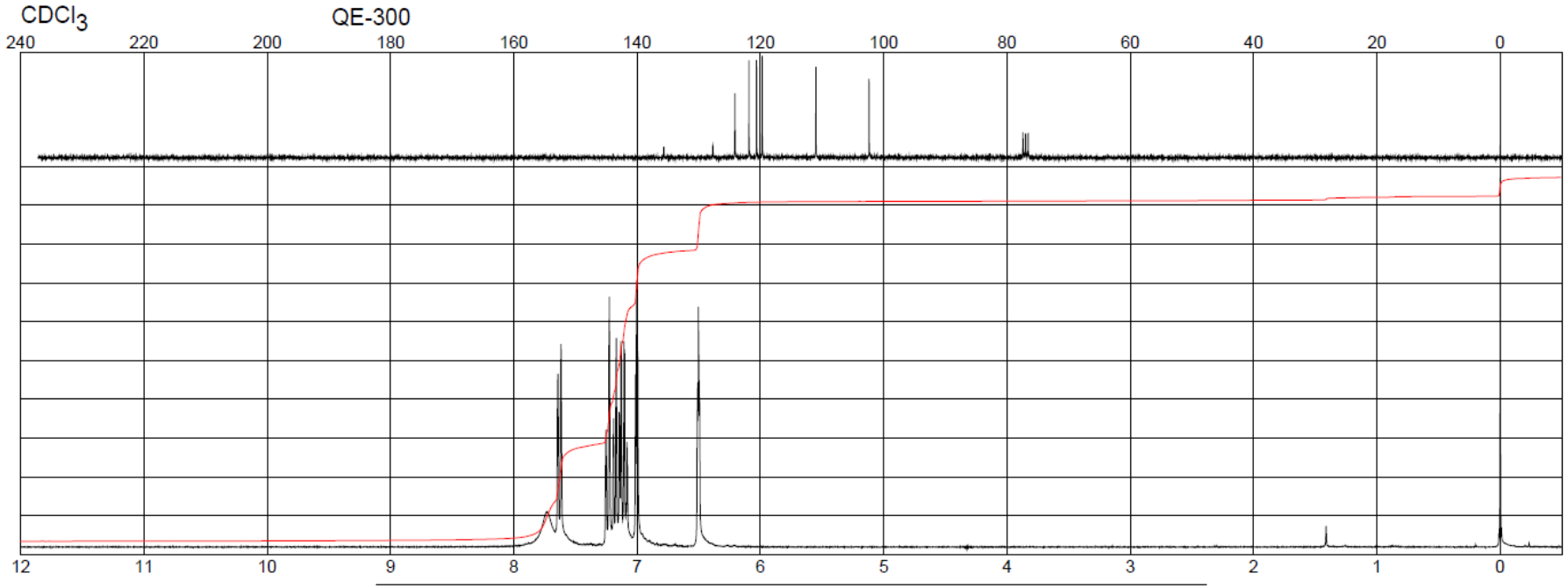
https://en.wikipedia.org/wiki/Cation%E2%80%93pi_interaction

Señales más importantes en ^{1}H-NMR

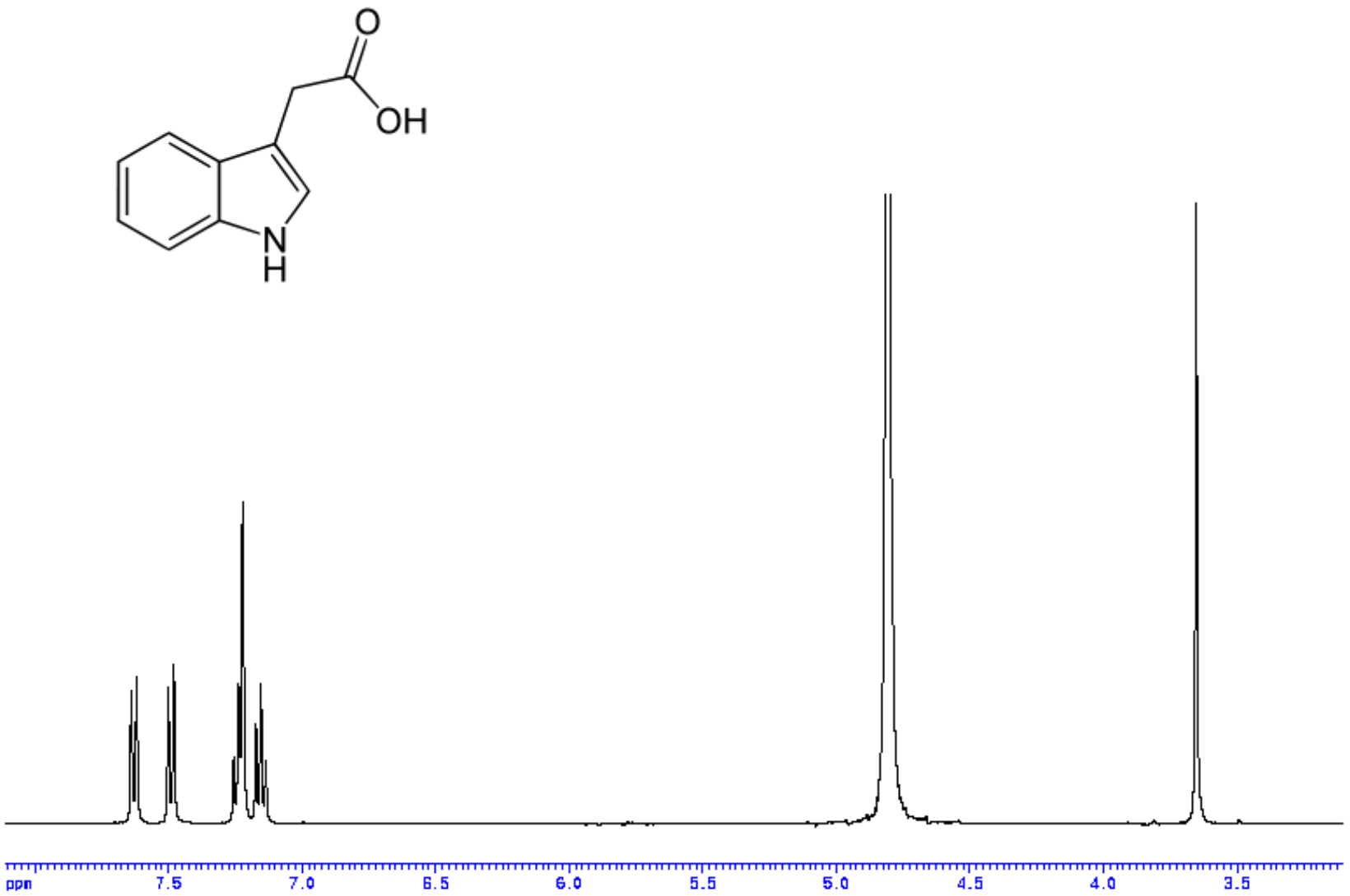




https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2016/ra/c6ra01391k/unauth#!divAbstract



https://www.sigmaaldrich.com/spectra/fnmr/FNMR010753.PDF



http://www.bmrb.wisc.edu/metabolomics/mol_summary/show_data.php?id=bmse000177

Síntesis de Indoles de Fisher
Obtención 1,2,3,4-tetrahidrocarbazol

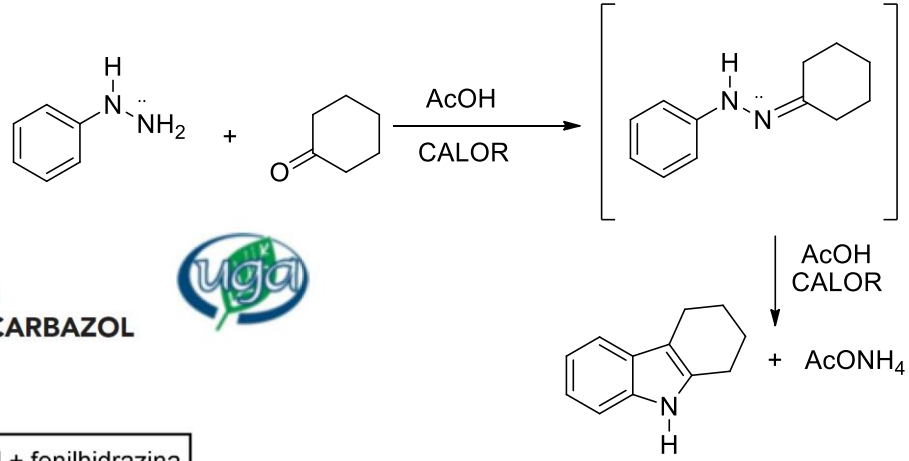
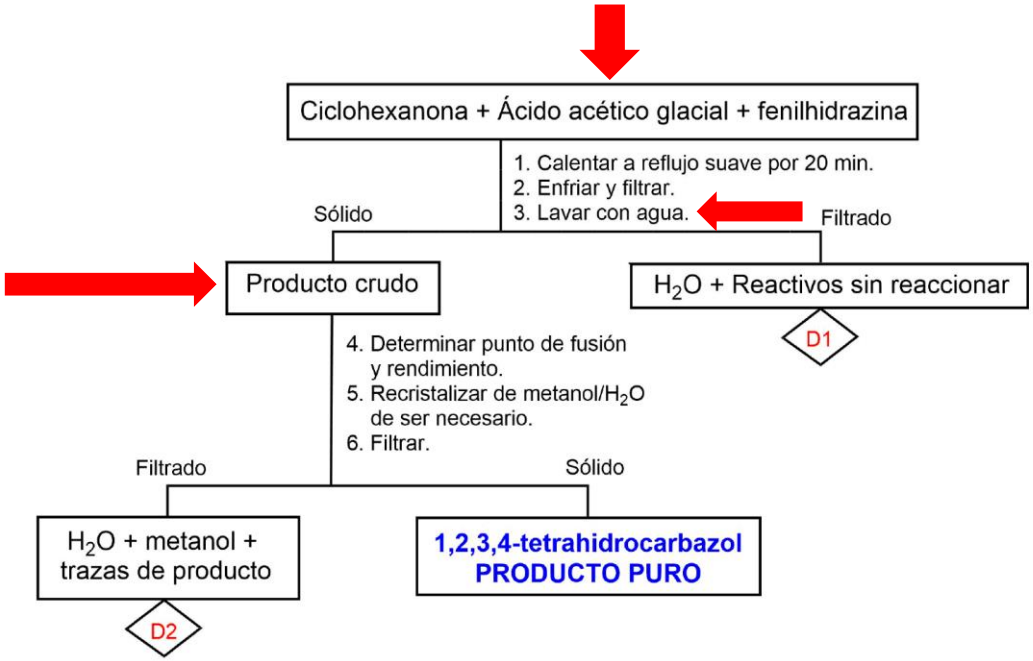
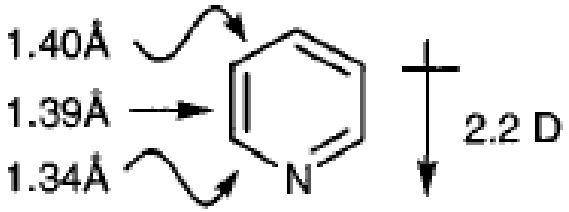


DIAGRAMA DE FLUJO DE LA OBTENCIÓN DEL 1,2,3,4-TETRAHIDROCARBAZOL

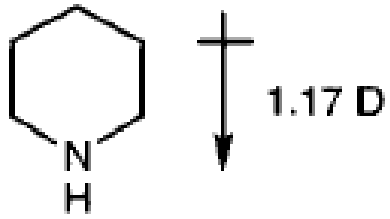


D1: Neutralizar, decolorar de ser necesario y eliminar en el drenaje con suficiente agua.

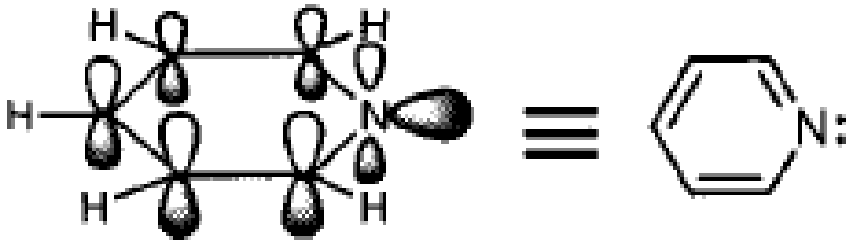
D2: Guardar el etanol para destilarlo al final del semestre, sólo si la cantidad de etanol es considerable.

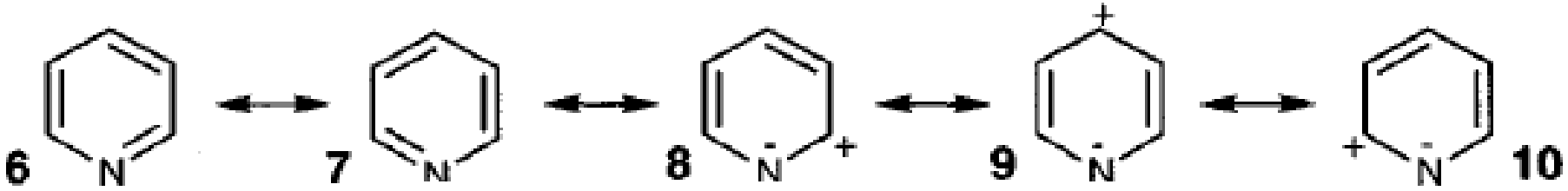


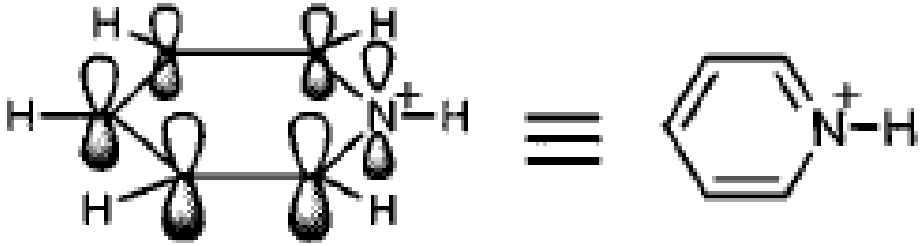
Piridina



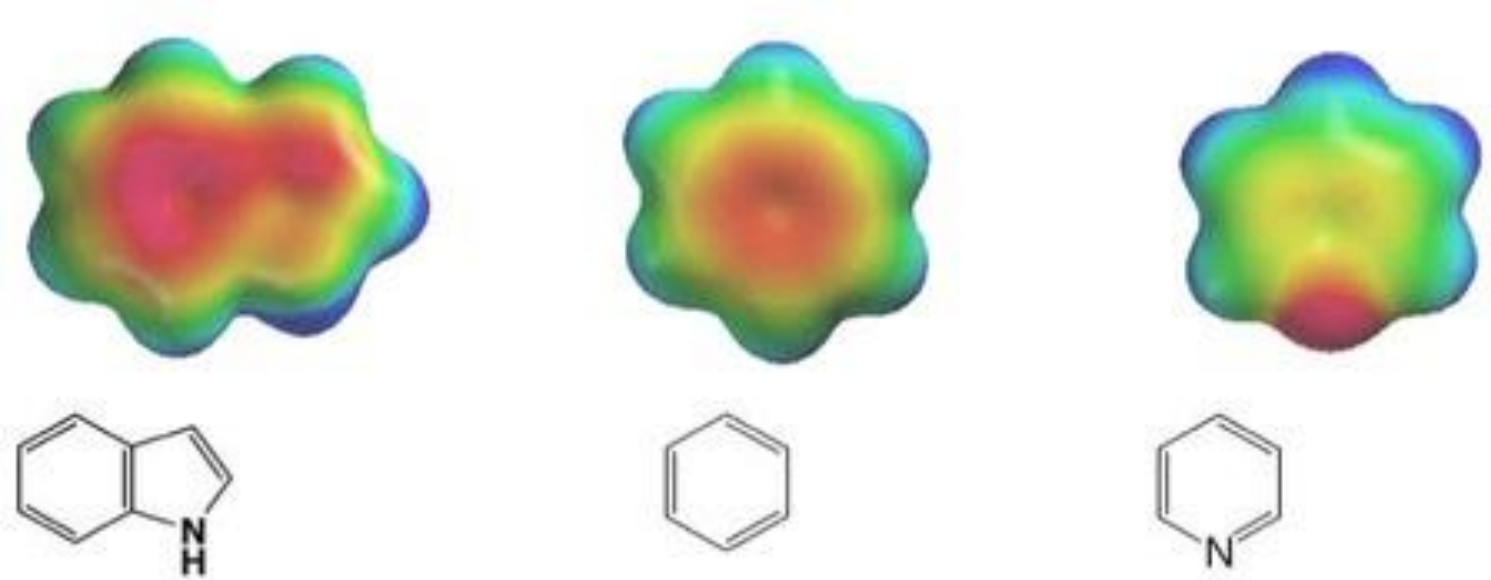
Piperidina







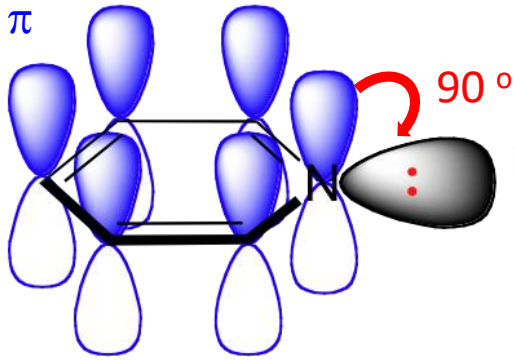
Catión 1-H-piridinio



https://en.wikipedia.org/wiki/Cation%E2%80%93pi_interaction

http://www.usc.es/congresos/ecsoc/15/hall_e_CC/e001/index.pdf

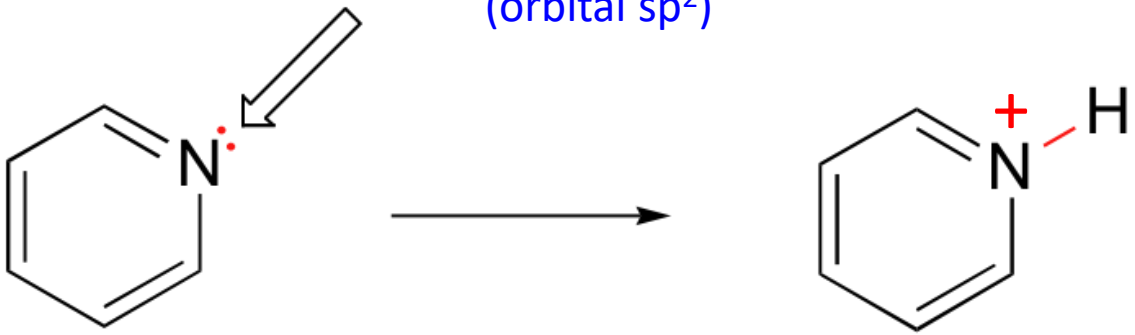
Nube π
6 electrones π



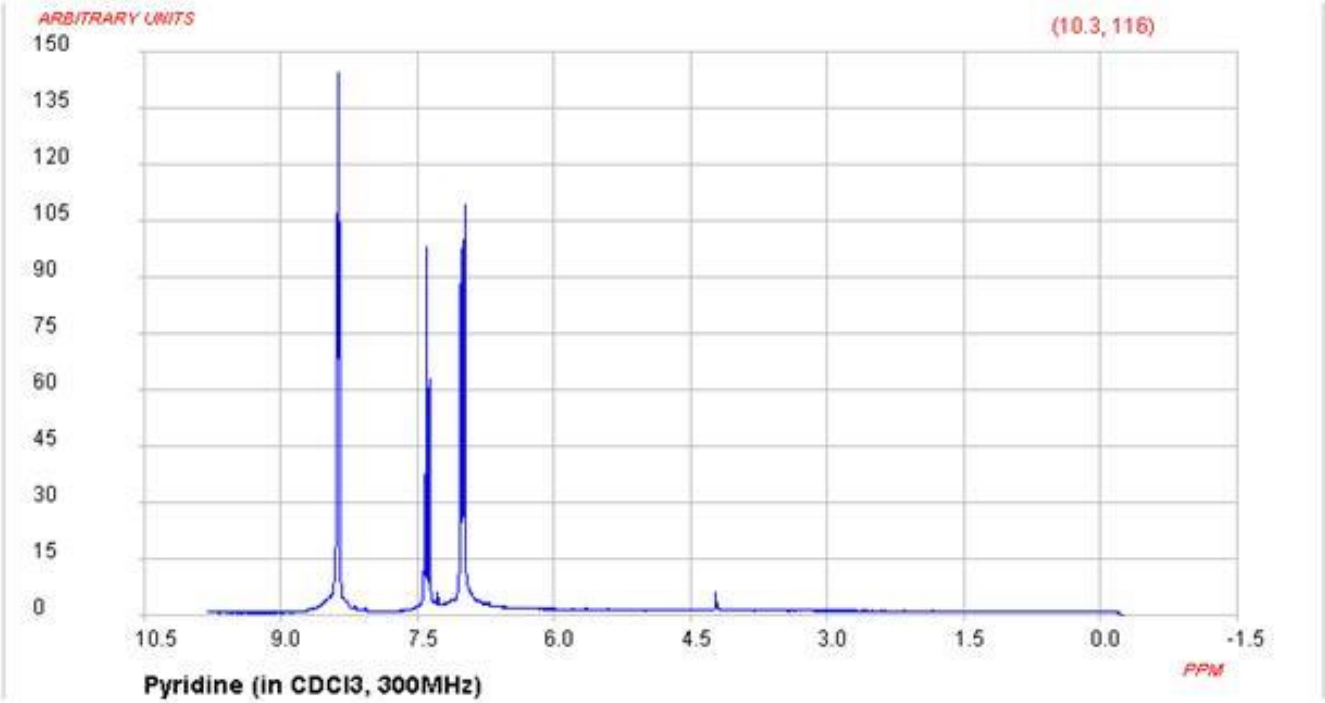
Par libre de electrones
(orbital sp^2)

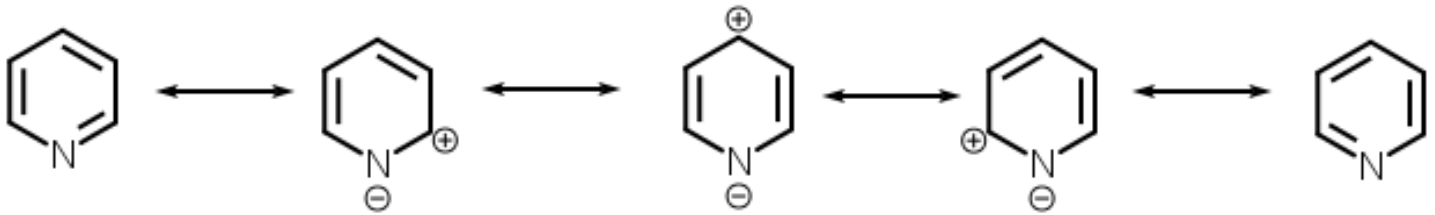
Si las aminas son básicas, ¿la piridina es una base?

Par libre de electrones
(orbital sp^2)



Ion piridinio pKa = 5.3





https://chemistry.stackexchange.com/questions/17070/proton-nmr-signals-and-rings

Síntesis de Hantzch de 1,4-dihidropiridina y reacción de oxidación con sales de perácidos. Obtención de piridinas

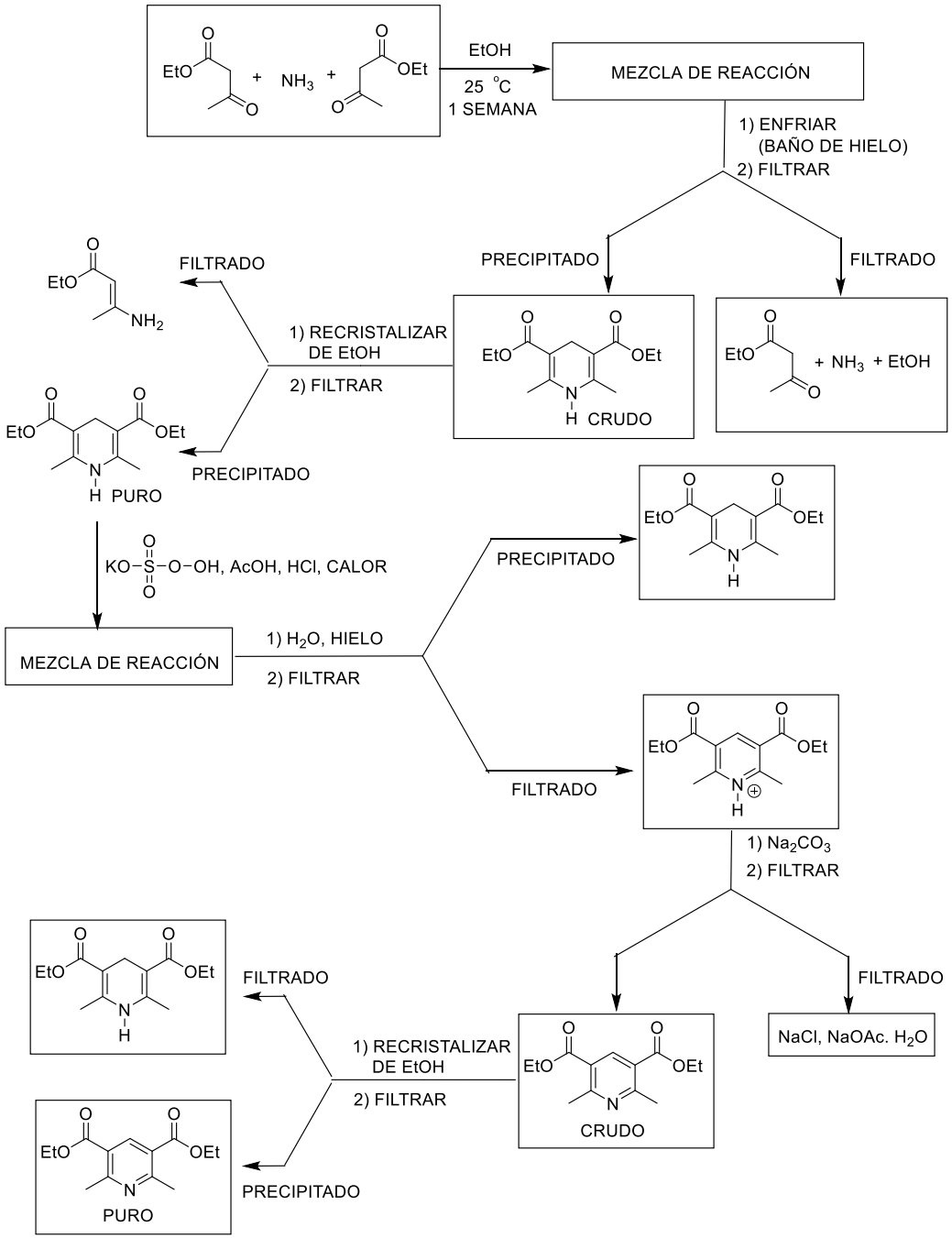
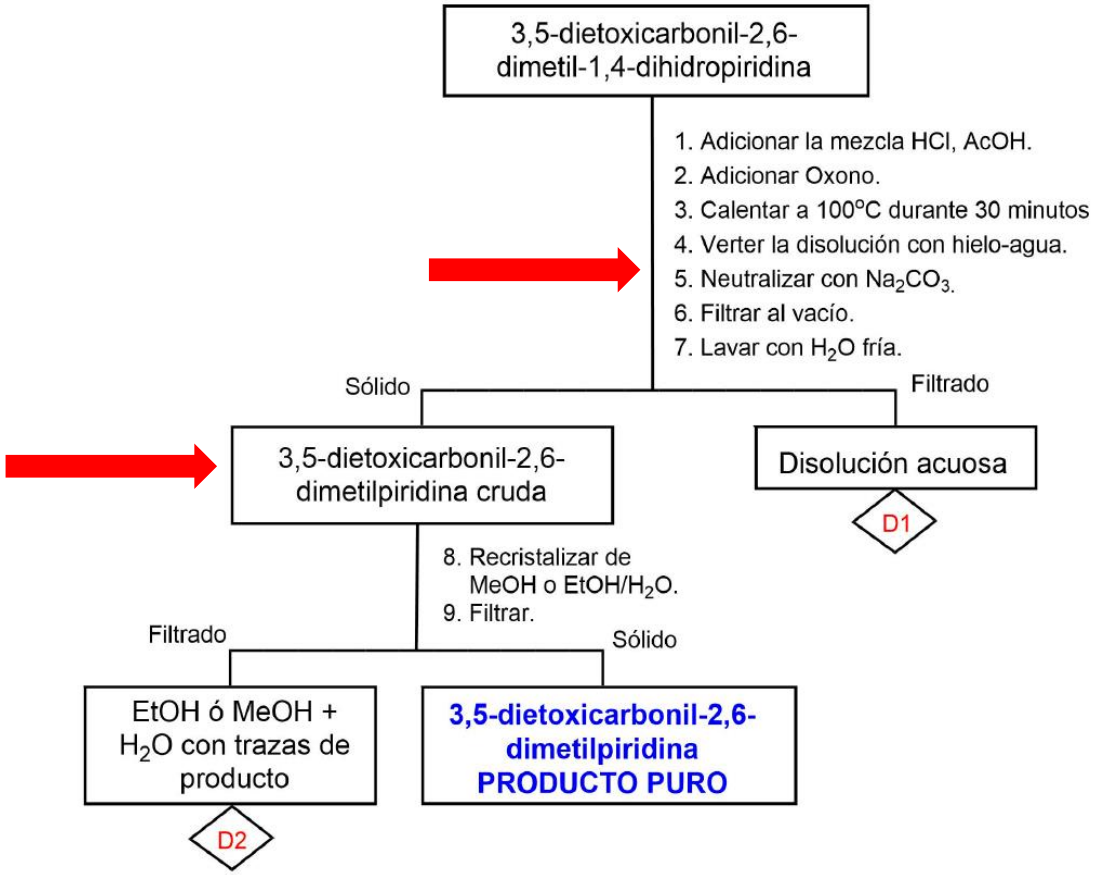
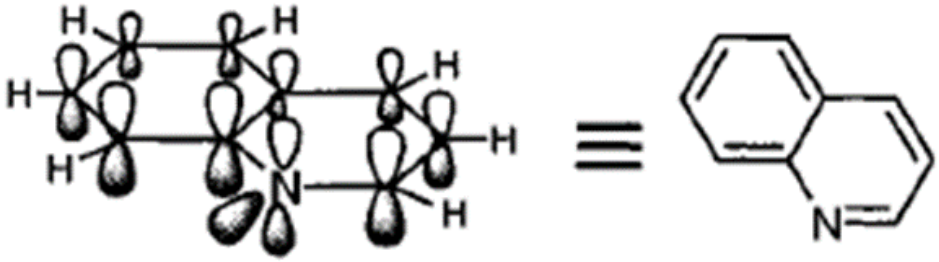


DIAGRAMA DE FLUJO DE LA OBTENCIÓN DE 3,5-DIETOXICARBONIL-2,6-DIMETILPIRIDINA

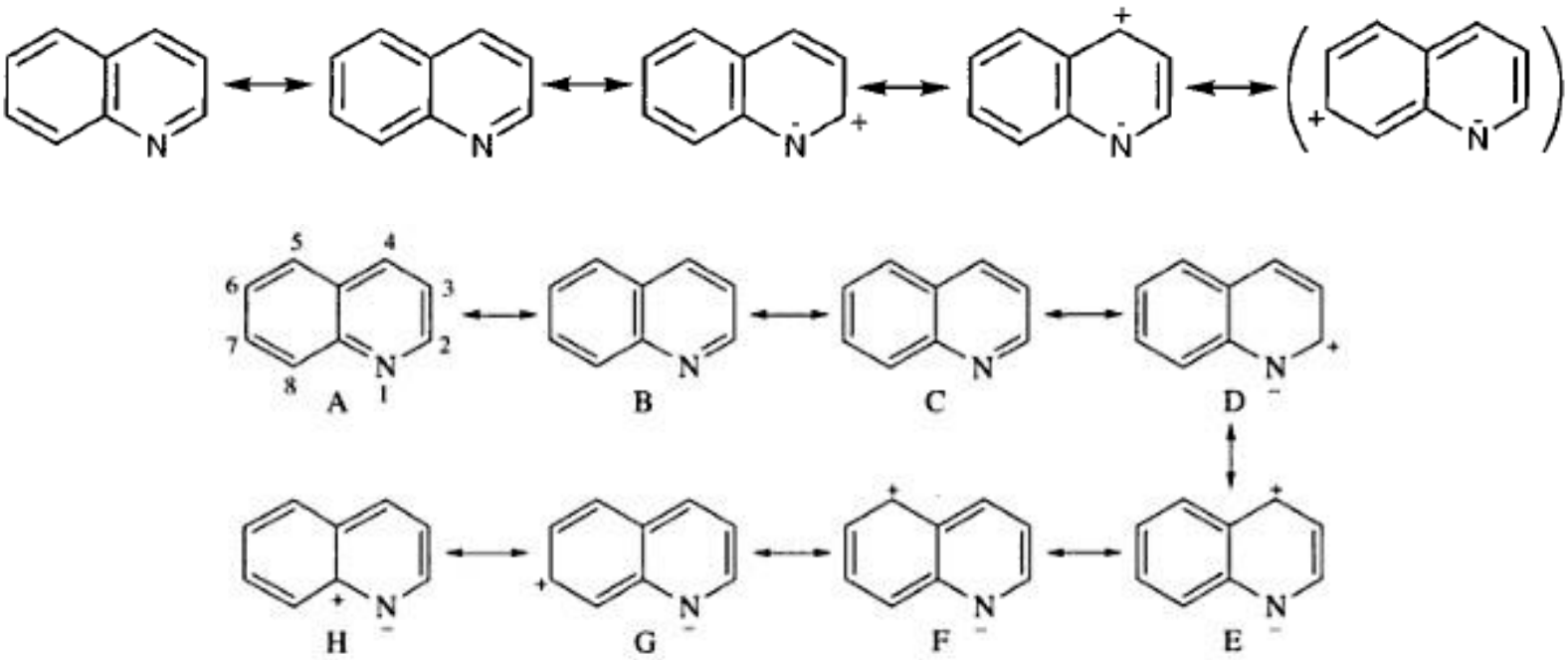


D1: Filtrar la disolución, el sólido se empaca para incineración y el líquido se desecha neutro.

D2: Guardar para recuperar el alcohol por destilación al final del semestre.

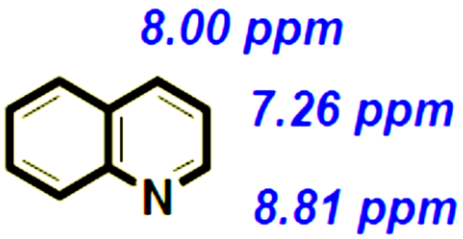


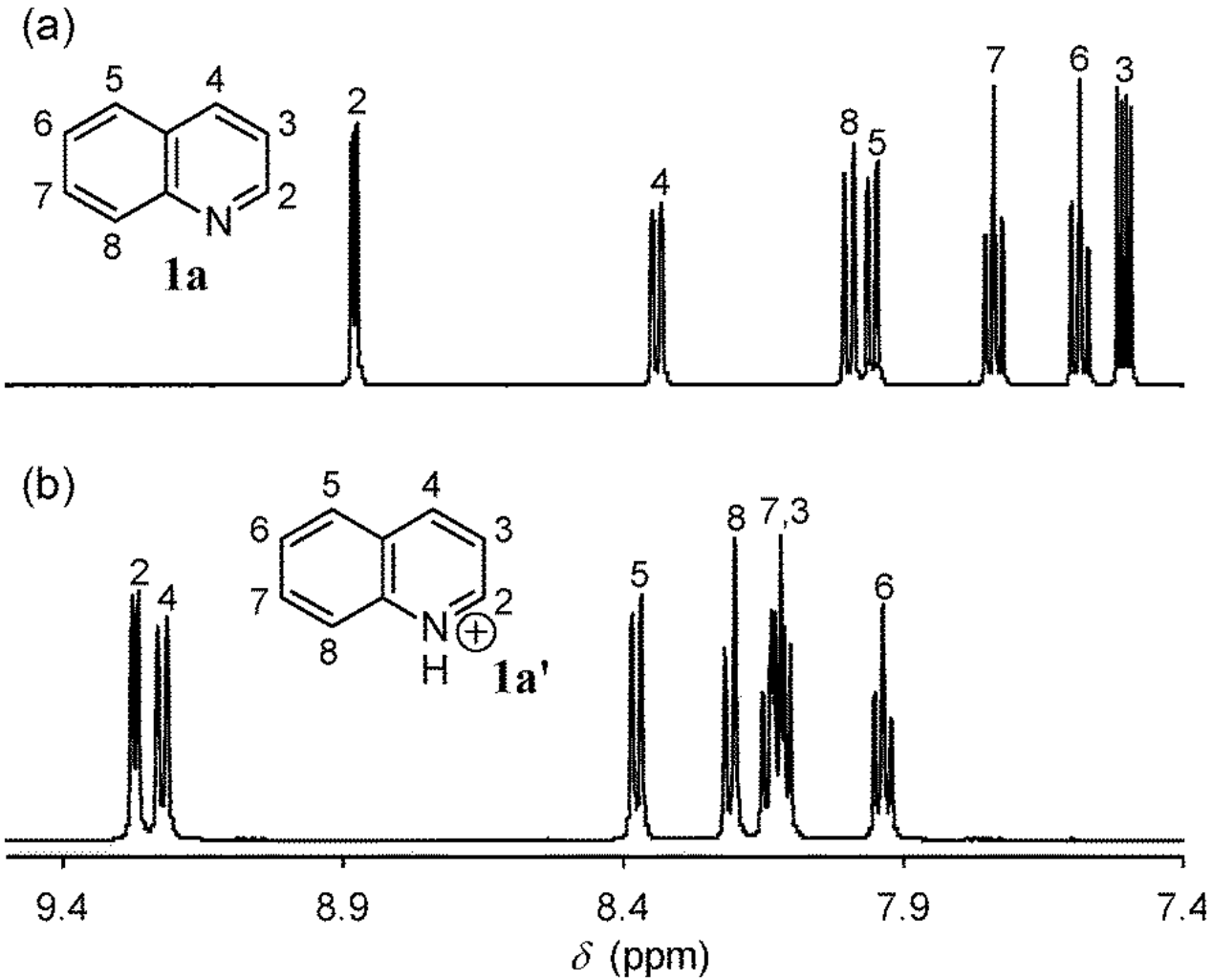
Quinolina



Longitudes de enlace

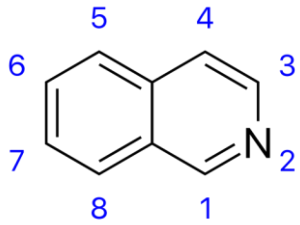
Señales más importantes en ^{1}H-NMR



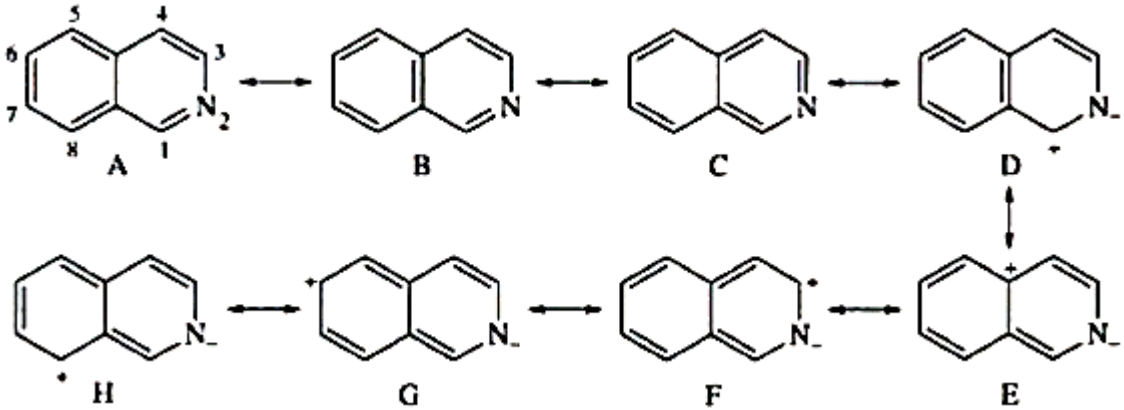


https://chemistry.stackexchange.com/questions/17070/proton-nmr-signals-and-rings

Isoquinolina

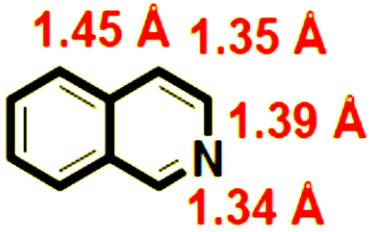


https://en.wikipedia.org/wiki/Isoquinoline#/media/File:Isoquinoline_numbered.svg

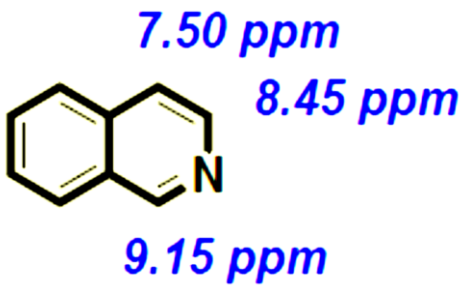


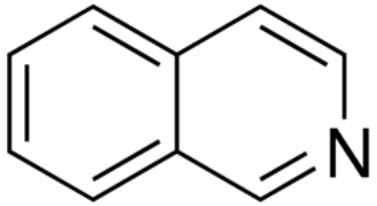
http://www.tutorsglobe.com/homework-help/chemistry/benzopyridines-710035.aspx

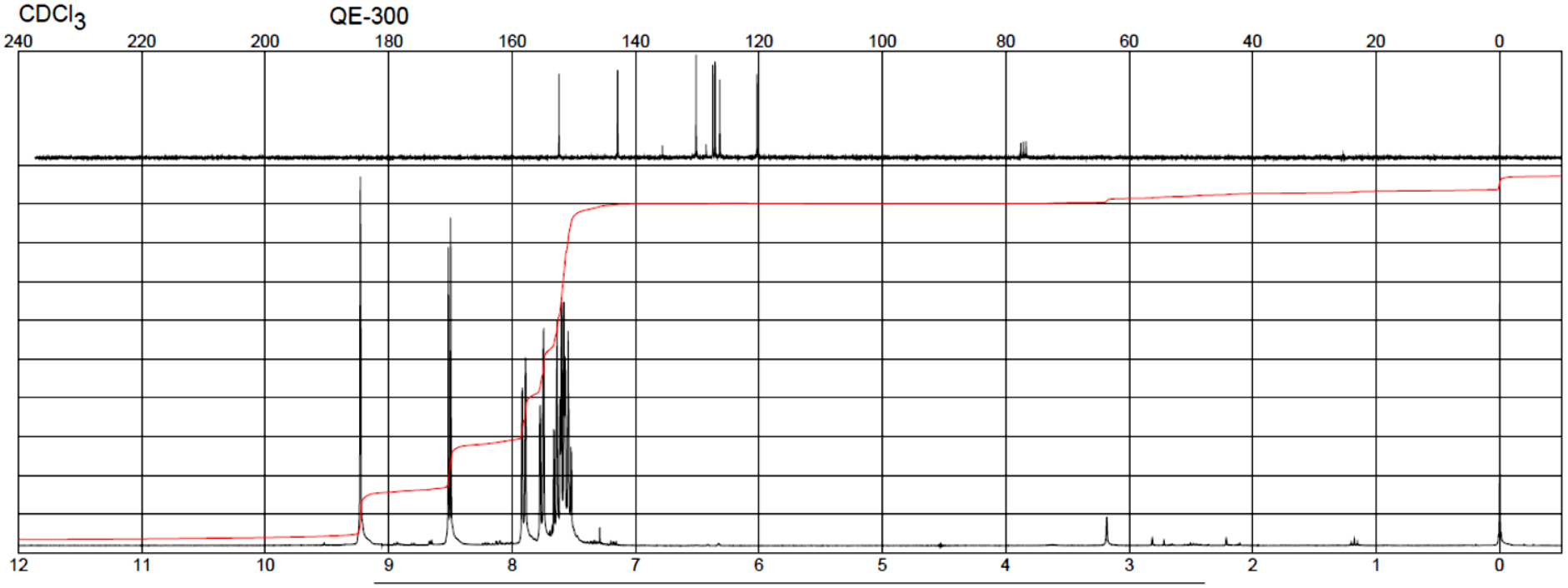
Longitudes de enlace



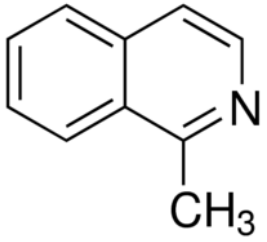
Señales más importantes en ^{1}H-NMR

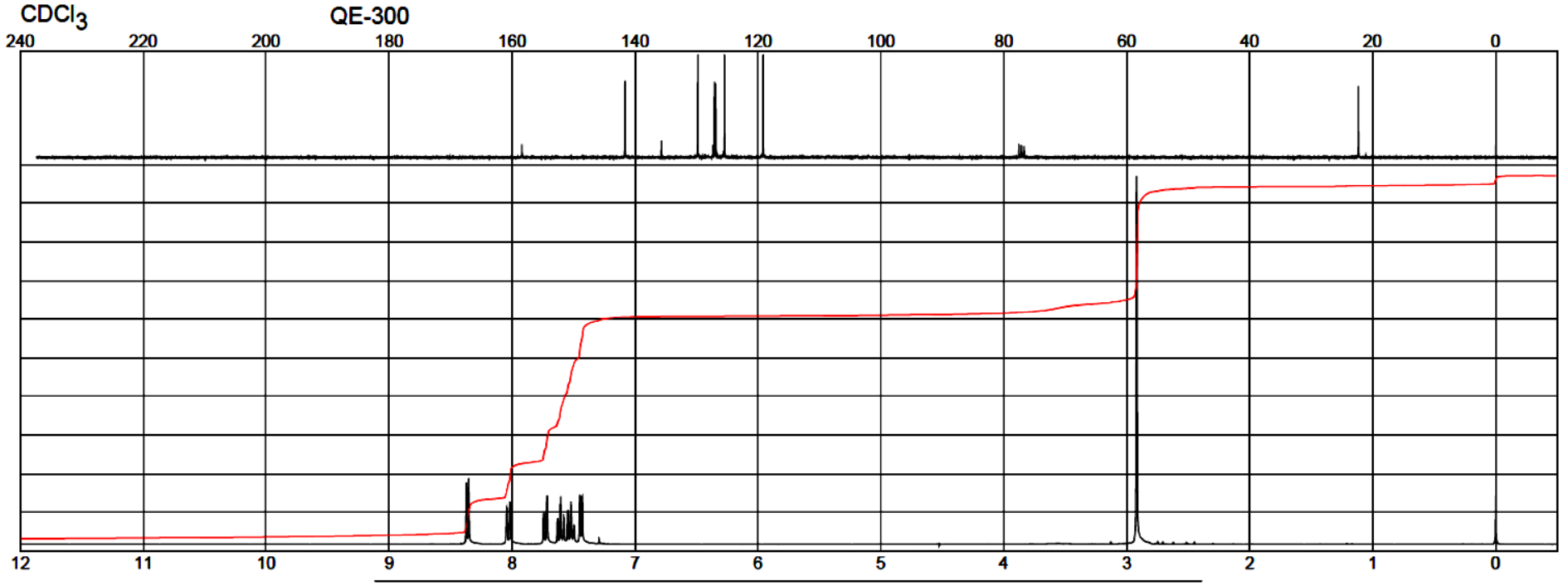






https://www.sigmaaldrich.com/spectra/fnmr/FNMR010750.PDF

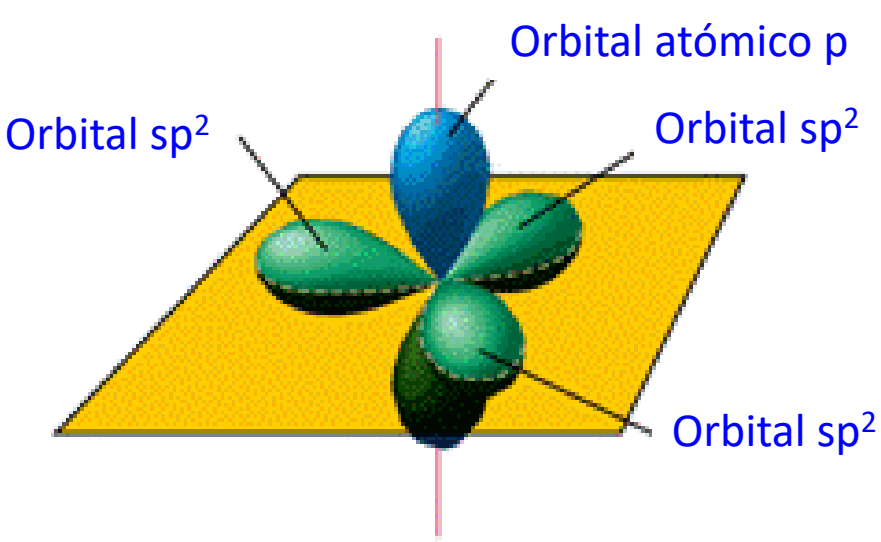


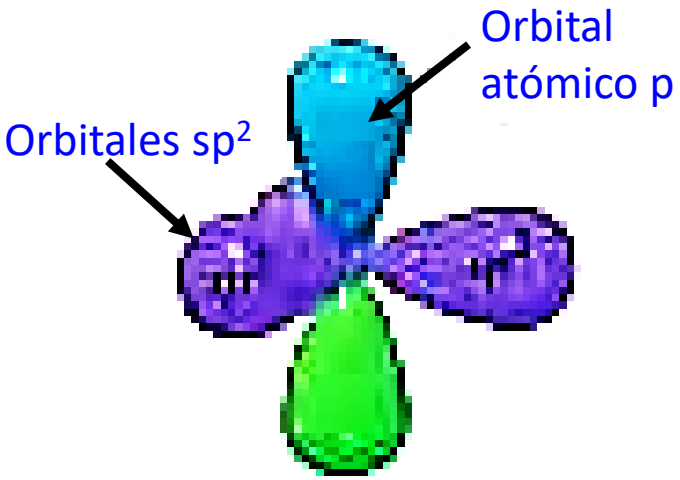


https://www.sigmaaldrich.com/spectra/fnmr/FNMR004877.PDF

Criterios para determinar si un compuesto va a ser aromático:

1) Ciclo
2) Átomos del ciclo con hibridación sp^2, y por lo tanto con un orbital p:

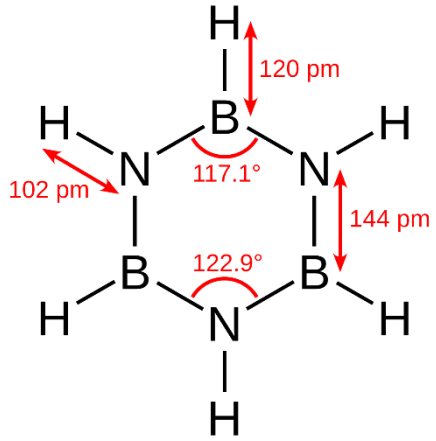




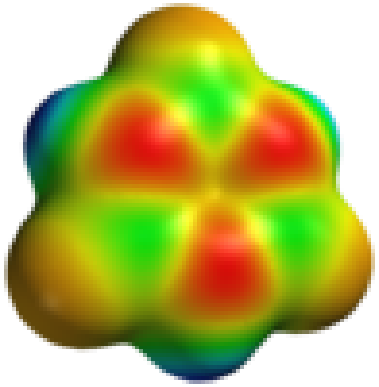
3) Número de electrones en el sistema π que cumplan con la regla de Hückel:

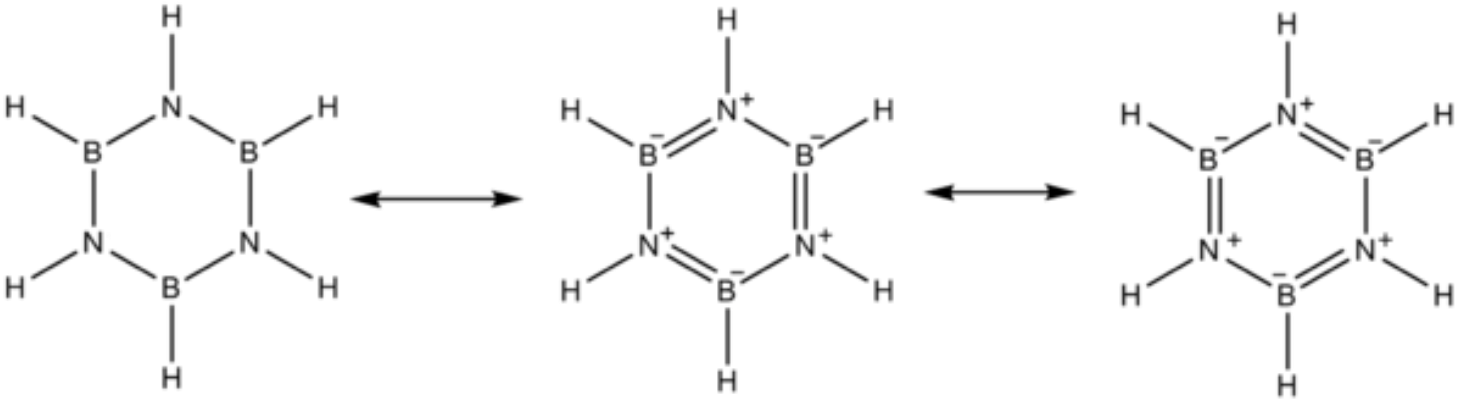
$(4n + 2)$, n = número entero

4) Molécula plana



Borazina





benceno inorgánico