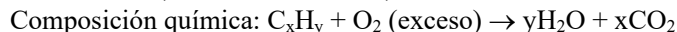


Guía del curso QUÍMICA ORGÁNICA I (1311)

INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA ORGÁNICA

1. Control del fuego.

2. Antoine Laurent Lavoisier (Francés, 1743-1794).



Química Inorgánica – Materia inerte, minerales.

Química Orgánica – Materia de fuentes naturales y vivas.

Química Orgánica – Estudio de los compuestos de carbono.

3. Jöns Jacob Berzelius (Sueco, 1779-1848).

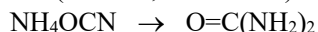
Química Orgánica como el estudio de compuestos derivados de fuentes naturales.

Teoría del vitalismo:

Todo sistema viviente posee una “fuerza vital”.

Se creía que solamente se podrían sintetizar los compuestos inorgánicos en el laboratorio pero no los orgánicos.

4. Friedrich Wöhler (Alemania, 1800-1882).



Cianato de amonio \rightarrow Urea \Rightarrow Existen isómeros.

5. Teoría estructural.

Friedrich August Kekulé (Alemania, 1829-1896).

Carbono forma cuatro enlaces y podía enlazarse con otros carbonos y formar cadenas e isómeros.

Archibald S. Couper (Escocés, 1831-1892).

Alexander M. Butlerov (Ruso, 1828-1886).

6. Teoría electrónica de la estructura y la reactividad.

Gilbert N. Lewis (Estadounidense, 1875-1946).

Describe el enlace covalente en términos de pares de electrones compartidos.

Sir Robert Robinson (Inglés, 1886-1975).

Sir Christopher Ingold (Inglés, 1893-1970).

Mecanismos de reacción enfocados en la transferencia de electrones.

Linus Pauling (Estadounidense, 1901-1994).

Esquema de enlaces más complicados usando la resonancia.

7. Ver los premios Nobel en química.

8. Influencia de la Química Orgánica.

Culturas antiguas usaban compuestos químicos como el alcohol etílico, el vinagre, extractos de hierbas para curar enfermedades y colorantes como el índigo y el púrpura de tiro.

Química orgánica tiene gran importancia en la industria de los colorantes y textiles. Nailon, primera fibra sintética. Neopreno, sustituto del hule.

Casi todos los fármacos que se recetan en la actualidad para el tratamiento de enfermedades son compuestos orgánicos, naturales o sintéticos.

Todo lo que usamos tiene que ver con la química en general, y una gran mayoría con la química orgánica.

9. Química Orgánica es la parte de la química que estudia los compuestos de carbono (con excepción del sulfuro de carbono, los óxidos de carbono y sus derivados).

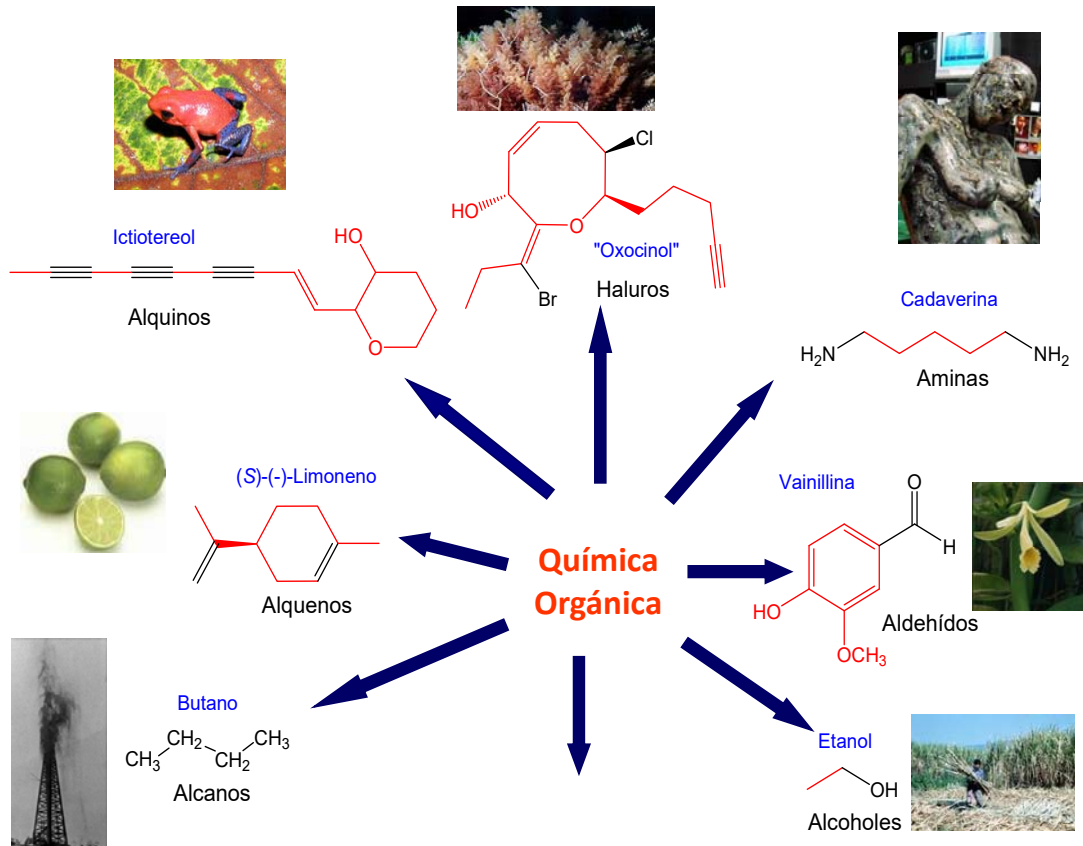
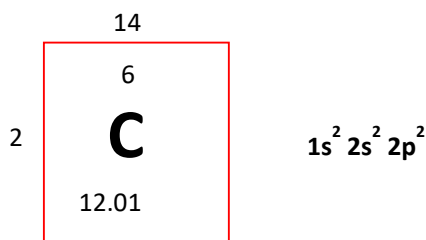


Tabla Periódica de los Elementos Químicos de la IUPAC

| | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-------------------------------|--------------------------------|-----------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|-------------------------------|---------------------------------|------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|---------------------------------|-------------------------------|-----------------------------|-------------------------------|
| 1 H hidrógeno 1.008 | 2 He helio 4.0026 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 3 Li litio 6.94 | 4 Be berilio 9.0122 | | | | | | | | | | | 5 B boro 10.810 | 6 C carbono 12.011 | 7 N nitrógeno 14.007 | 8 O oxígeno 15.999 | 9 F flúor 18.998 | 10 Ne neón 20.180 |
| 11 Na sodio 22.990 | 12 Mg magnesio 24.305 | | | | | | | | | | | 13 Al aluminio 26.982 | 14 Si silicio 28.085 | 15 P fósforo 30.974 | 16 S azufre 32.06 | 17 Cl cloro 35.45 | 18 Ar argón 39.948 |
| 19 K potasio 39.098 | 20 Ca calcio 40.078 | 21 Sc escandio 44.956 | 22 Ti titanio 47.867 | 23 V vanadio 50.942 | 24 Cr cromo 51.996 | 25 Mn manganeso 54.938 | 26 Fe hierro 55.845 | 27 Co cobalto 58.933 | 28 Ni níquel 58.693 | 29 Cu cobre 63.546 | 30 Zn zinc 65.382 | 31 Ga galio 69.723 | 32 Ge germanio 72.630 | 33 As arsénico 74.922 | 34 Se selenio 78.971 | 35 Br bromo 79.904 | 36 Kr kriptón 83.796 |
| 37 Rb rubidio 85.468 | 38 Sr estroncio 87.62 | 39 Y itrio 88.906 | 40 Zr zirconio 91.224 | 41 Nb niobio 92.906 | 42 Mo molibdeno 95.95 | 43 Tc tecnecio | 44 Ru rutenio 101.072 | 45 Rh rodio 102.91 | 46 Pd paladio 106.42 | 47 Ag plata 107.87 | 48 Cd cadmio 112.41 | 49 In indio 114.82 | 50 Sn estano 118.71 | 51 Sb antimonio 121.76 | 52 Te teluro 127.603 | 53 I yodo 126.90 | 54 Xe xenón 131.29 |
| 55 Cs cesio 132.91 | 56 Ba bario 137.33 | 57-71 lantánidos | 72 Hf hafnio 178.492 | 73 Ta tantalio 180.95 | 74 W wolframio 183.84 | 75 Re renio 186.21 | 76 Os osmio 190.233 | 77 Ir iridio 192.22 | 78 Pt platino 195.08 | 79 Au oro 196.97 | 80 Hg mercurio 200.59 | 81 Tl talio 204.38 | 82 Pb plomo 207.2 | 83 Bi bismuto 208.98 | 84 Po polonio | 85 At astato | 86 Rn radón |
| 87 Fr francio | 88 Ra radio | 89-103 actínidos | 104 Rf rutherfordio | 105 Db dubnio | 106 Sg seaborgio | 107 Bh bohrio | 108 Hs hassio | 109 Mt meitnerio | 110 Ds darmstadtio | 111 Rg roentgenio | 112 Cn copernicio | 113 Nh nihonio | 114 Fl flerovio | 115 Mc moscovio | 116 Lv livermorio | 117 Ts teneso | 118 Og oganesón |
| 57 La lantano 138.91 | 58 Ce cerio 140.12 | 59 Pr praseodimio 140.91 | 60 Nd neodimio 144.24 | 61 Pm prometio | 62 Sm samario 162.90 | 63 Eu europio 151.96 | 64 Gd gadolinio 157.25 | 65 Tb terbio 158.93 | 66 Dy disprosio 162.50 | 67 Ho holmio 164.93 | 68 Er erbio 167.26 | 69 Tm tulio 168.93 | 70 Yb iterbio 173.05 | 71 Lu lutecio 174.97 | | | |
| 89 Ac actinio | 90 Th torio 232.04 | 91 Pa protactinio 231.04 | 92 U uranio 238.03 | 93 Np neptunio | 94 Pu plutonio | 95 Am americio | 96 Cm curio | 97 Bk berkelio | 98 Cf californio | 99 Es einsteinio | 100 Fm fermio | 101 Md mendelévio | 102 No nobelio | 103 Lr lawrencio | | | |

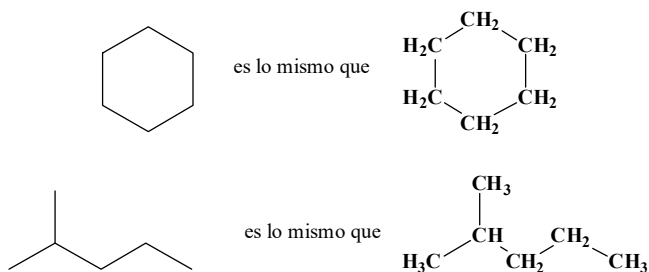


Teoría estructural de Kekule.

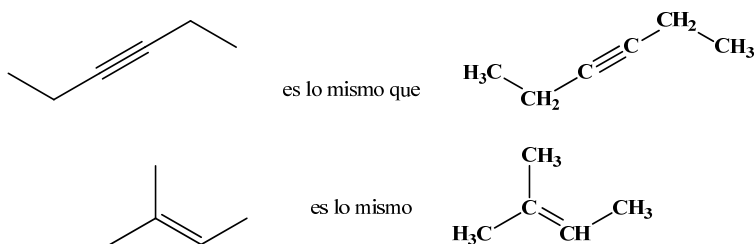
De acuerdo con la regla del octeto y por datos experimentales, los átomos de carbono en los compuestos orgánicos siempre forman cuatro enlaces. Esta tetravalencia tiene por consecuencia la abrumadora cantidad de más de 10 millones de compuestos orgánicos del carbono, contra sólo 150 000 compuestos inorgánicos conocidos. Además de la existencia de isómeros estructurales debido al fenómeno conocido como concatenación del átomo de carbono. El átomo de carbono en los compuestos orgánicos siempre es tetravalente y los enlaces que presenta pueden ser sencillos, dobles y triples.

Estructuras de enlace-línea.

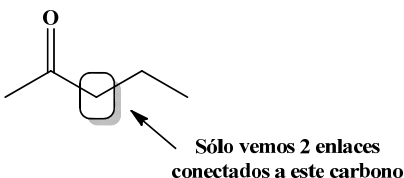
Los dibujos de enlace-línea muestran el esqueleto de carbono de la molécula. Las líneas deben dibujarse en forma de zigzag, de esa forma el final de cada línea representa un átomo de carbono. Es común olvidar que el final de las líneas representa a átomos de carbono. Cuando se dibujen los enlaces intentar dibujar los otros enlaces lo más alejados posible.

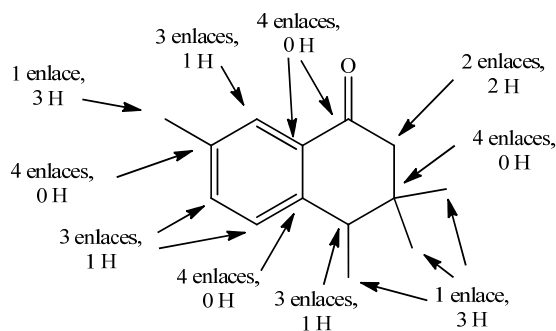


Los enlaces dobles se muestran con dos líneas, y los enlaces triples con tres líneas.

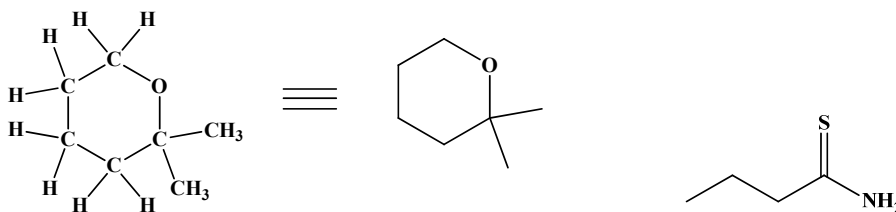


Los átomos de hidrógeno no se muestran en un dibujo de enlace-línea. Los átomos de carbono neutros siempre forman en total 4 enlaces. Se asume que hay 2 átomos de hidrógeno unidos a ese átomo de carbono. Sólo necesitamos contar el número de enlaces que se ven sobre el átomo de carbono, entonces sabremos que debe de haber tantos átomos de hidrógeno para dar un total de 4 enlaces.

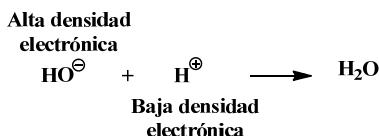




Todos los átomos, o grupos, diferentes a C-H, deben dibujarse (O, N, S, OH, NH, NH₂, SH, P, Br, Li, Mg, etc.).

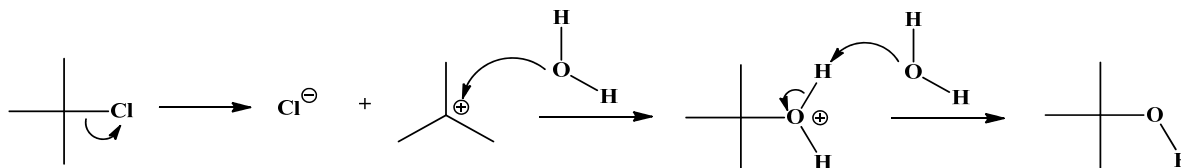


El 95% de las reacciones ocurre porque una molécula tiene una región de baja densidad electrónica y otra molécula tiene una región de alta densidad electrónica. Estas moléculas se atraen lo cual causa una reacción. Entonces para predecir cómo y cuándo dos moléculas reaccionarán, necesitamos primero predecir dónde hay una baja densidad electrónica y dónde hay una alta densidad electrónica.



Mecanismos de reacción.

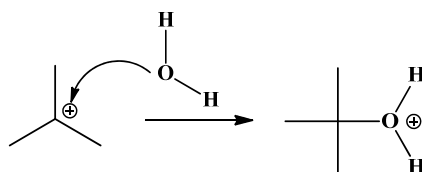
Cuando dos compuestos reaccionan para formar productos, debemos tratar de entender cómo es que la reacción ocurre. Cada reacción involucra un flujo de densidad electrónica, los electrones se mueven para romper y formar enlaces. Los mecanismos ilustran como es que esos electrones se mueven durante la reacción. El flujo de electrones se indica con una flecha curva.



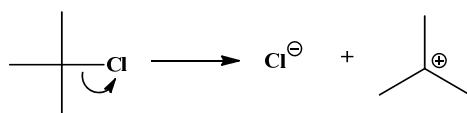
En un mecanismo indican como es que se mueven los electrones para ROMPER y FORMAR enlaces. Cada flecha tiene un cola y una punta. La cola indica “de donde vienen” los electrones y la punta indica “hacia donde van” los electrones. La cola de la flecha debe venir de un par de electrones no enlazado o de romper un enlace, y la punta de la flecha debe apuntar hacia la formación de un enlace o de un par de electrones no enlazado.

Sólo hay tres opciones:

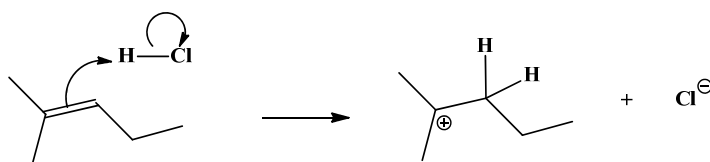
1. Par de electrones no enlazado → Formar un enlace. La cola de la flecha viene de un par de electrones no enlazado del oxígeno y apunta hacia la formación del enlace entre el carbono y el oxígeno.



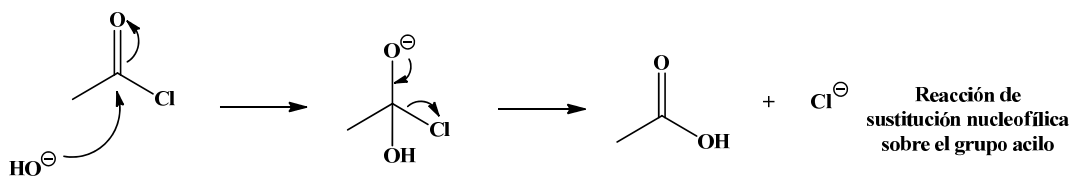
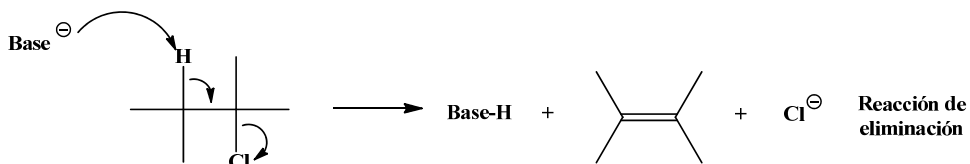
2. Romper un enlace \rightarrow Formar un par de electrones no enlazado. La cola de la flecha viene del enlace C-Cl y apunta hacia la formación de un par de electrones no enlazado sobre el átomo de cloro. Los dos electrones del enlace C-Cl van hacia el Cl, el átomo de C pierde un electrón y el cloro gana un electrón. Es decir, se forma un carbono con una carga positiva (carbocatión) y un cloro con una carga negativa (ion cloruro).



3. Romper un enlace \rightarrow Formar un enlace. La cola de la primera flecha viene del enlace *pi* y apunta hacia la formación de un enlace con el hidrógeno. La segunda flecha viene del enlace H-Cl y apunta hacia la formación de un par de electrones no enlazado sobre el átomo de cloro.



Dependiendo de cómo se rompan o formen enlaces en una reacción, a veces hay que dibujar más de una flecha. Notar que todas las flechas van en una dirección.

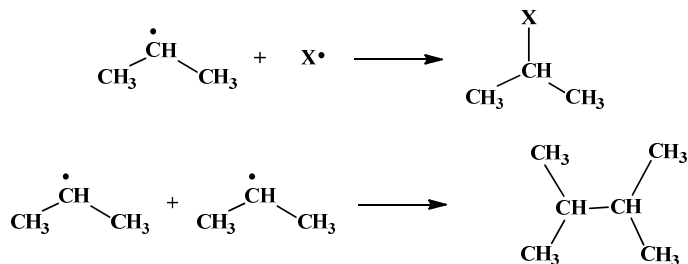
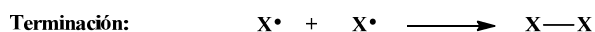


GRUPOS FUNCIONALES.

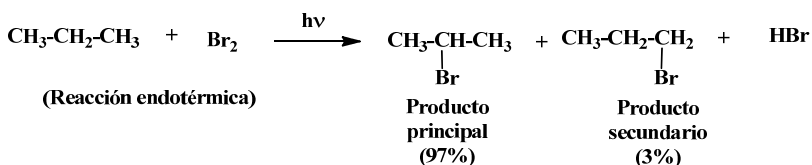
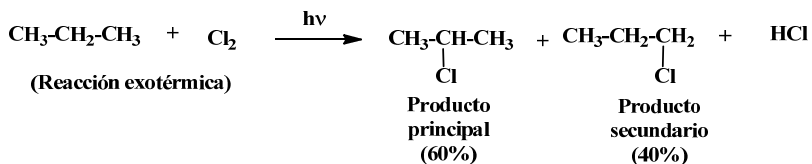
Resumen de nomenclatura IUPAC ordenada según prioridad numérica decreciente.

| Clase | Fórmula | Sufijo | Prefijo |
|-----------------------------------|----------------------------------|-----------------------------------|--|
| Cationes | R_4N^+ R_4P^+ R_3S^+ | -amonio -fosfonio -sulfonio | Amonio- Fosfonio- Sulfonio- |
| Ácidos carboxílicos | | Ácido -oico | Carboxi- |
| Anhídridos de ácidos carboxílicos | | Anhídrido -oico | |
| Ésteres de ácidos carboxílicos | | -oato de alquilo | Alcoxicarbonil- |
| Haluros de acilo | | Haluro de -oílo | Halogenoalcanoíl- |
| Amidas | | -amida | Amido- (Carbamoíl-) |
| Nitrilos | $-C\equiv N$ | -nitriilo | Ciano- |
| Aldehídos | | -al (-aldehído) | Oxo- (Alcanoíl-) |
| Cetonas | | -ona | Oxo- |
| Alcoholes | $-OH$ | -ol | Hidróxi- |
| Mercaptanos | $-SH$ | -tiol | Mercapto- |
| Aminas | | -amina | Amino- |
| Alquenos | | -eno* | Alquenil- |
| Alquinos | $-C\equiv C-$ | -ino* | Alquinil- |
| Alcanos | | -ano* | Alquil- |
| Éteres | $-O-$ | (éter) | Alcoxi- Éter |
| Sulfuros | $-S-$ | (sulfuro) | Alquiltio- Alquilsulfanil- Sulfuro |
| Haluros | $-X$ | -- | Haluro de |
| Nitro | $-NO_2$ | -- | Nitro- |

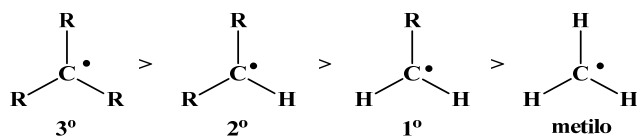
*Sufijos sobre una raíz. Los nombres de los alcanos, alquenos y alquinos son los nombres principales a partir de los cuales se derivan otros nombres por adición de sufijos y prefijos.



Ejemplo:

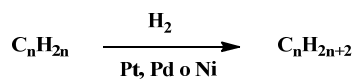


Estabilidad de radicales:



SÍNTESIS DE ALCANOS.

1. Hidrogenación de alquenos.

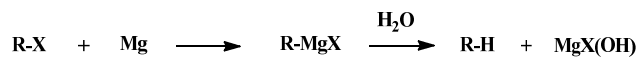


Ejemplo:

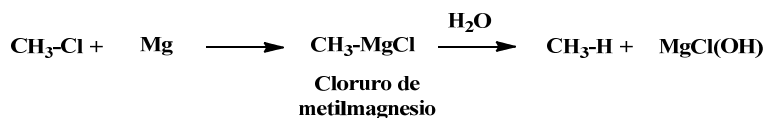


2. Reducción de haluros de alquilo.

a) Hidrólisis de reactivos de Grignard.

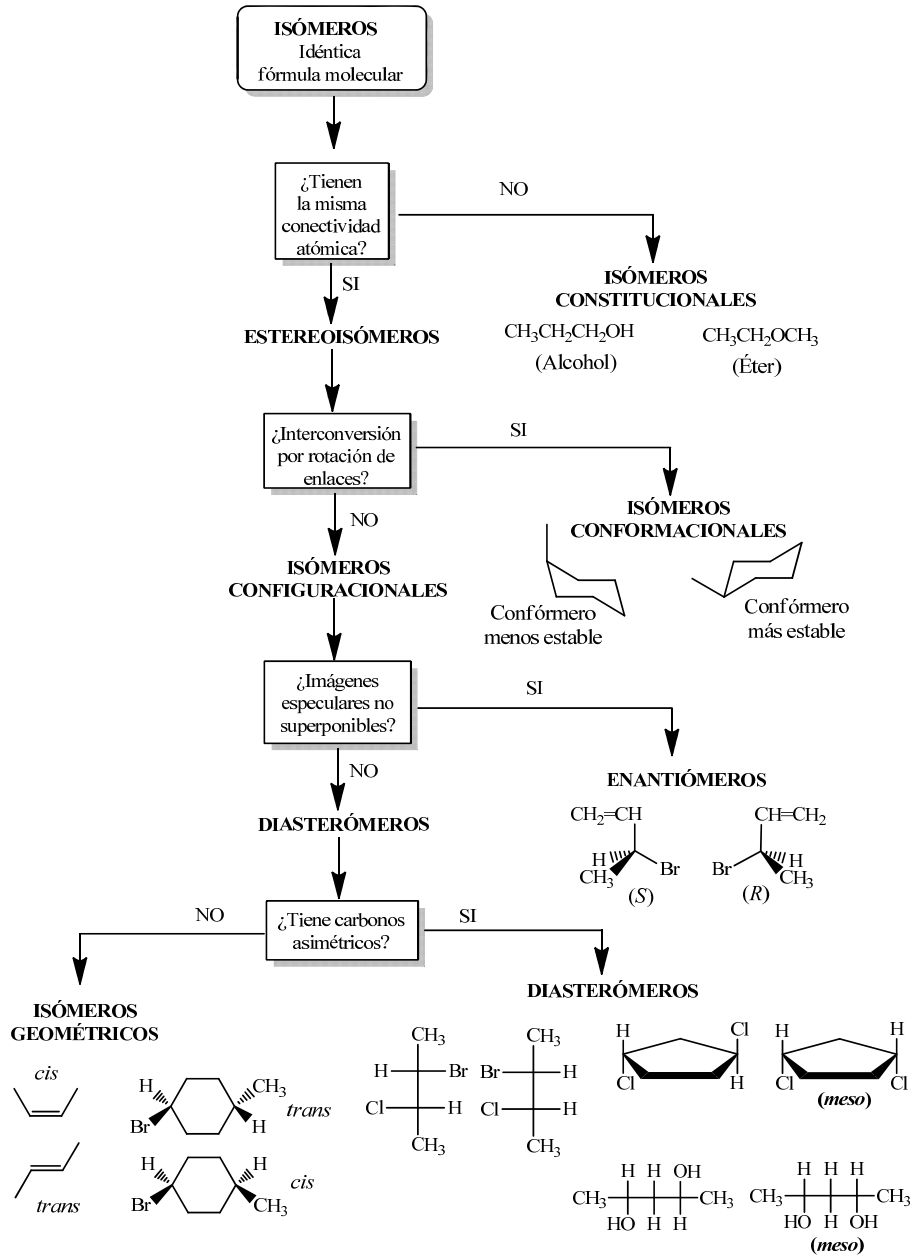


Ejemplo:

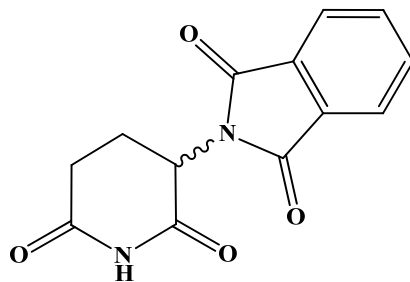


b) Reducción con metal y ácido.

ESTEREOQUÍMICA



IMPORTANCIA.



Talidomida (Alemania, 1958-1963)

Dextrorrotatorio
(Enantiómero *R*)

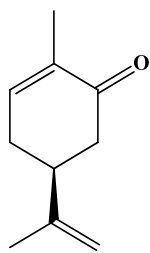
Levorrotatorio
(Enantiómero *S*)



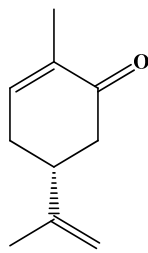
Insomnio y malestar matinal



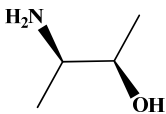
Teratógeno



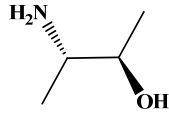
(S)-(+)-Carvona
Aroma de la semilla
del comino



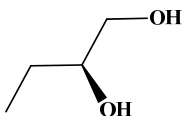
(R)-(-)-Carvona
Aroma del aceite
de la menta



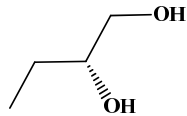
(2R,3R)-3-Aminobutan-2-ol
(Líquido)



(2R,3S)-3-Aminobutan-2-ol
(Sólido, $pf = 49^{\circ}C$)

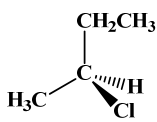


(S)-Butano-1,2-diol
(Agente terapéutico)

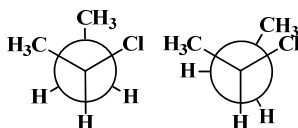


(R)-Butano-1,2-diol
(Veneno)

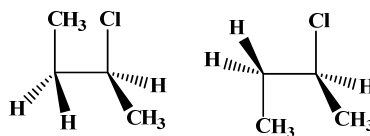
REPRESENTACIÓN TRIDIMENSIONAL DE LAS MOLÉCULAS EN UN PLANO.



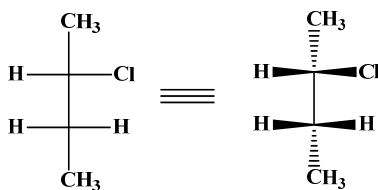
Cuña



Newman

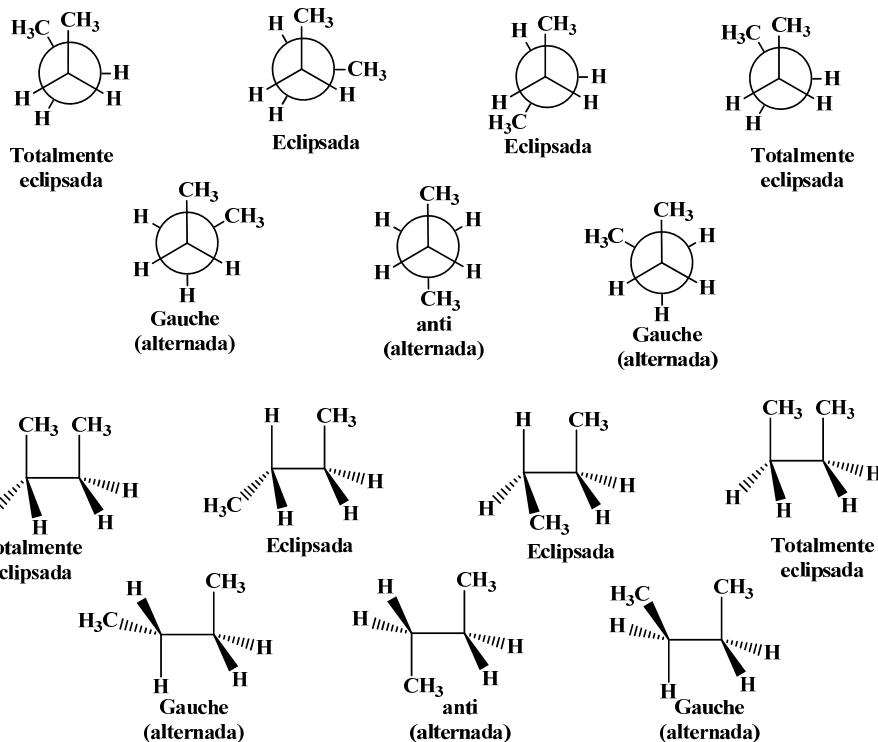
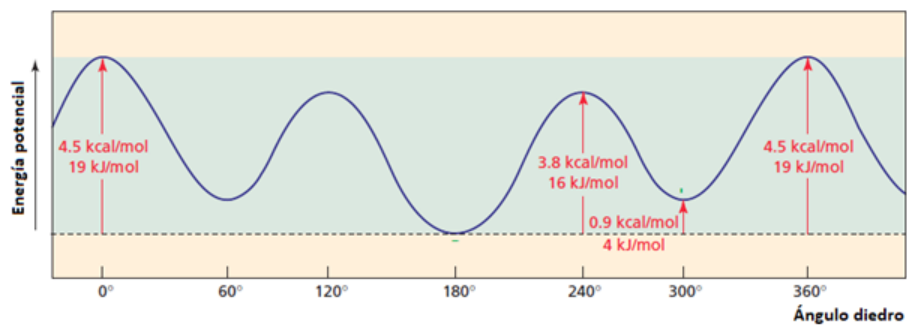


Caballete

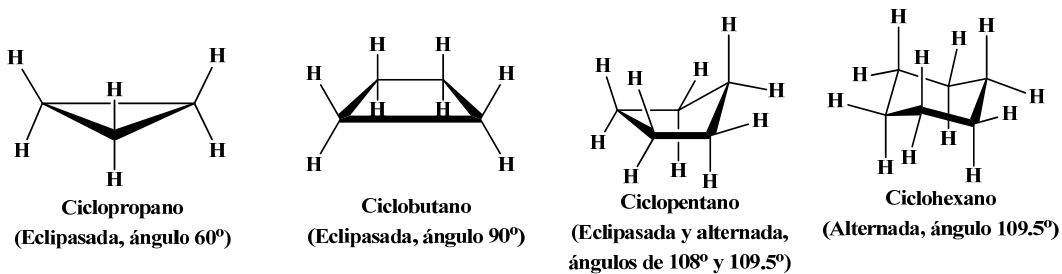


Fischer

Conformaciones en representación de Newman y caballete.

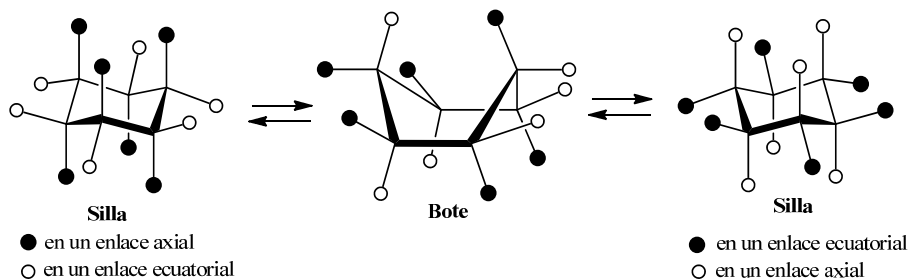


Estructura de los cicloalcanos.



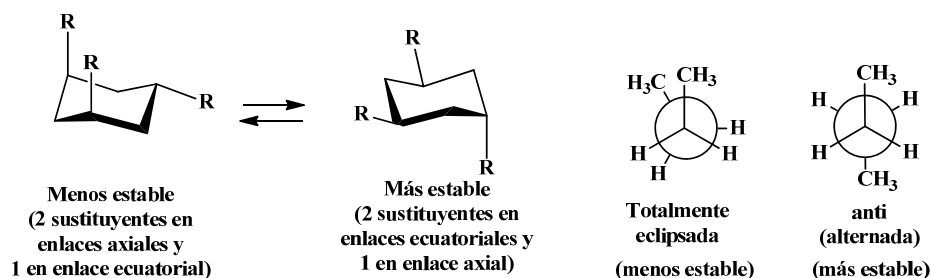
← Aumento de la tensión angular (Baeyer) y tensión torsional = Tensión de anillo

Conformaciones del ciclohexano.



CLASIFICACIÓN DE LOS ESTEREOISÓMEROS.

Isómeros conformacionales.



Reglas de prioridad de Cahn, Ingold y Prelog.

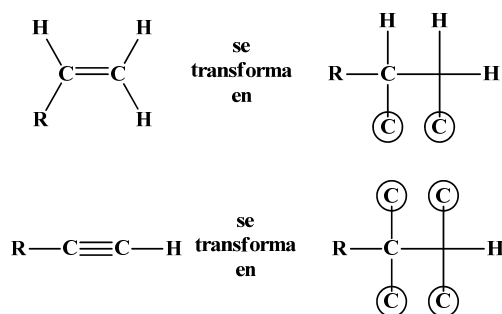
1. La prioridad se establece según el número atómico del átomo sustituyente. Un átomo tiene prioridad sobre otros de número atómico menor. Así pues, el hidrógeno es el que tiene una prioridad más baja. En caso de isótopos, el de mayor masa atómica tiene prioridad. (La prioridad 1 es la más alta).

Ejemplo: $I > Br > Cl > S > F > O > N > {}^{13}C > {}^{12}C > Li > {}^3H > {}^2H > {}^1H$

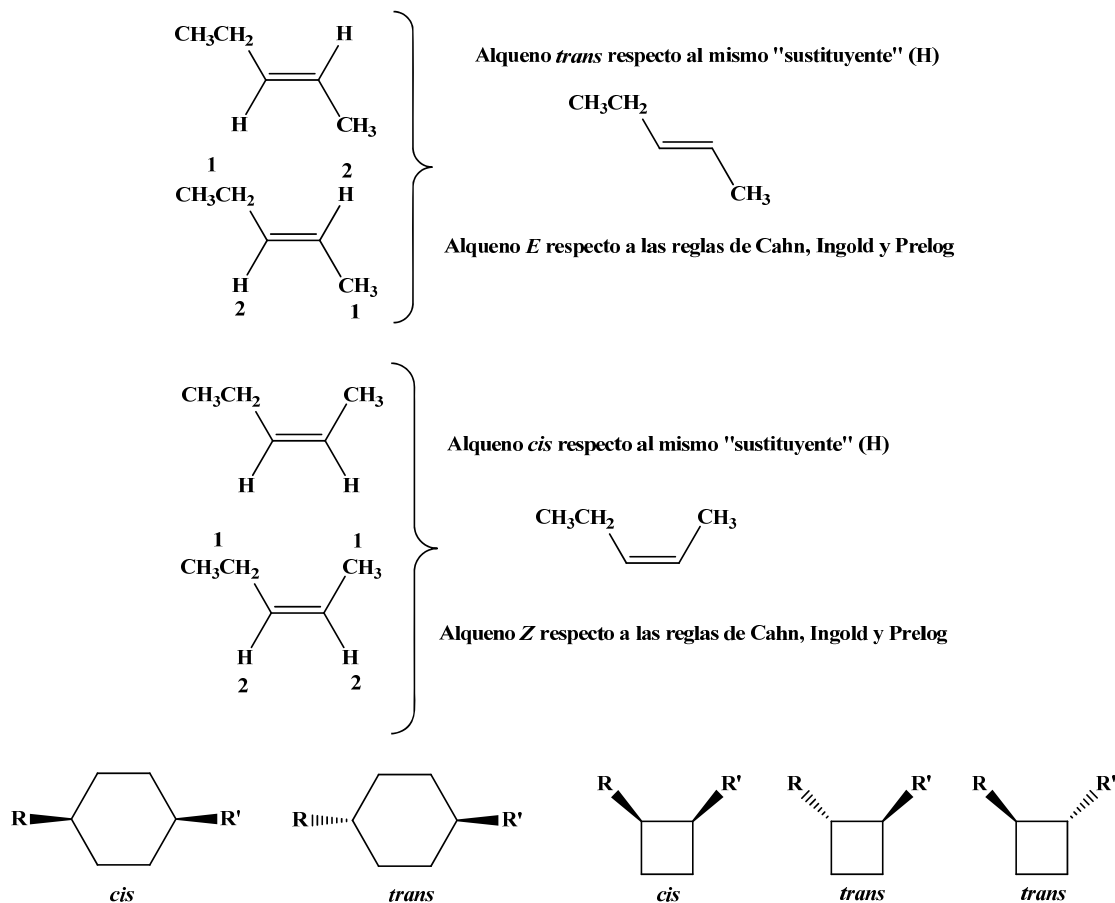
2. En caso de empate, se utilizan los siguientes átomos unidos.

Ejemplo: $-CH_2Cl > -CH(CH_3)_2 > -CH_2CH_2Br > -CH_2CH_3$

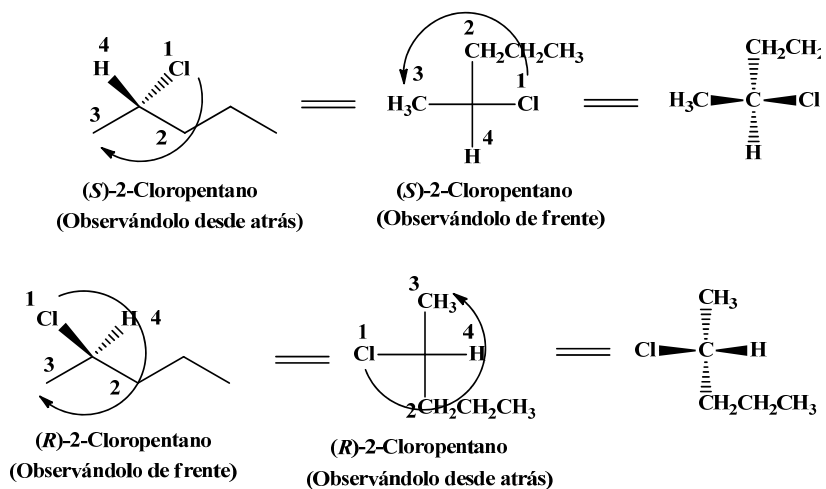
3. Los enlaces dobles y triples se tratan como si fueran un enlace hacia otro átomo.



Isómeros geométricos.

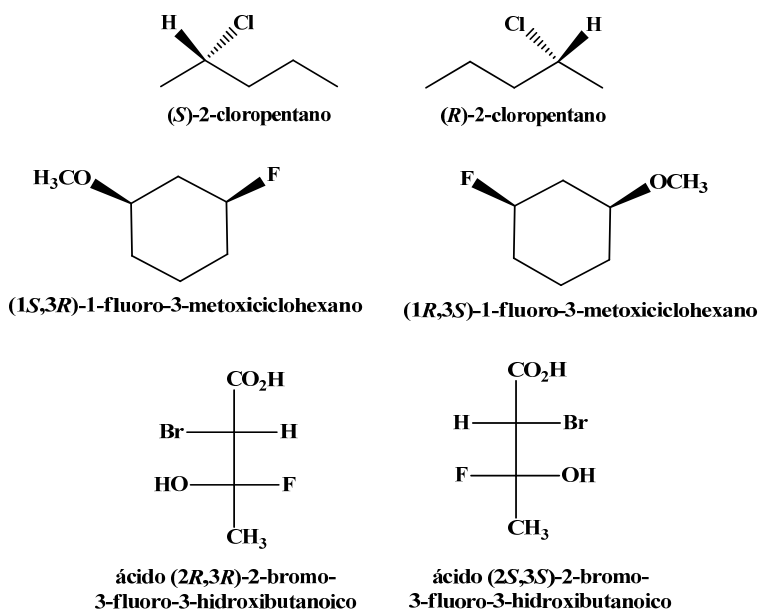


Carbono asimétrico. Un carbono asimétrico o carbono estereogénico es un átomo de carbono que está unido a cuatro grupos diferentes. Las moléculas que tienen uno o más carbonos asimétricos son moléculas quirales, excepto aquel que es un compuesto *meso*. A los carbonos asimétricos tienen imágenes especulares que tienen la configuración *R* o *S*, la cual se determina con las reglas de Cahn, Ingold y Prelog, observando la estructura de tal forma que el grupo con la prioridad más baja (prioridad 4) esté lo más alejado.



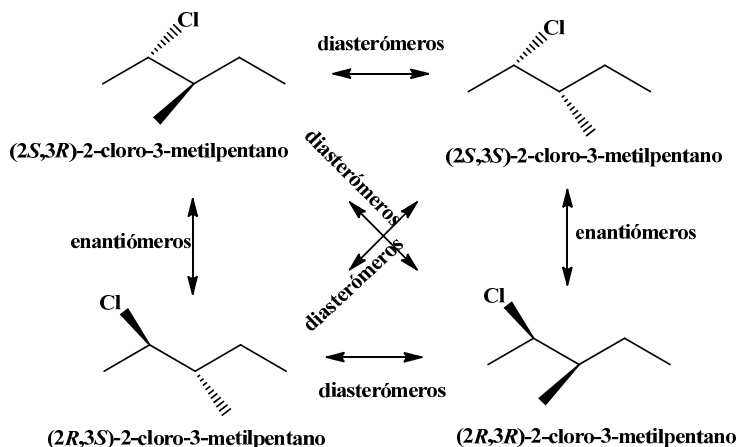
Enantiómeros.

Estereoisómeros que son imágenes especulares y que no son superponibles.

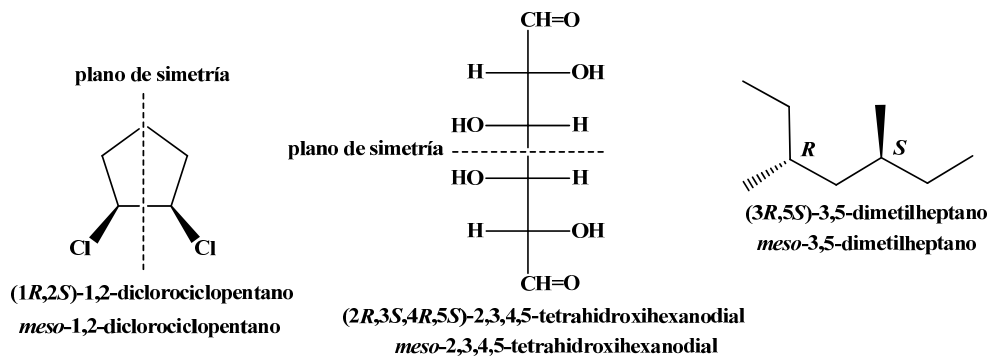


Diasterómeros.

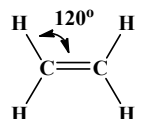
Estereoisómeros que no son imágenes especulares y que no son superponibles. Pueden ser isómeros geométricos o compuestos con dos o más carbonos asimétricos ($2^n =$ cantidad de estereoisómeros, donde $n =$ número de carbonos asimétricos).



Compuesto meso. Compuesto aquiral a pesar de tener átomos de carbono asimétricos, tiene un plano de simetría especular.



ALQUENOS

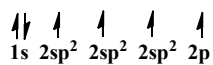


Geometría trigonal

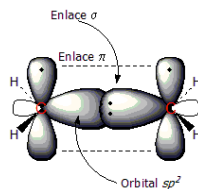
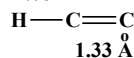
3 enlaces sigma (σ) y 1 enlace pi (π)

Hibridación sp^2

Configuración del átomo de carbono en los alquenos:



Distancia del enlace: 1.08 \AA

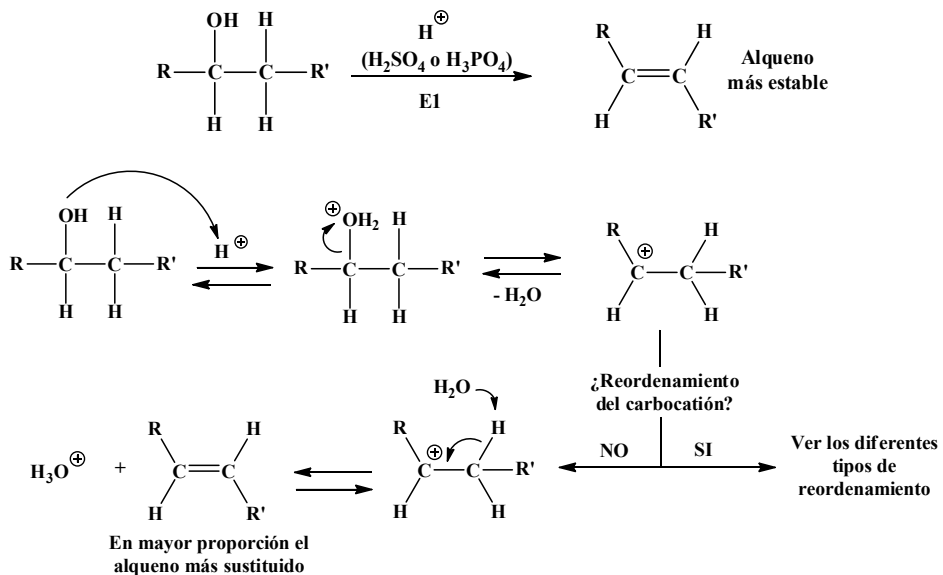


Nomenclatura de alquenos y cicloalquenos.

Propiedades físicas. Solubilidad, densidad, punto de ebullición y su variación con respecto al número de átomos de carbono y ramificaciones.

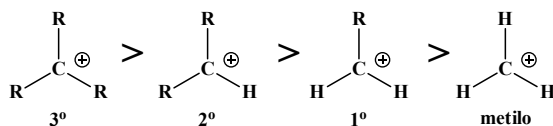
SÍNTESIS DE ALQUENOS

1. Deshidratación de alcoholes 3° y 2°.

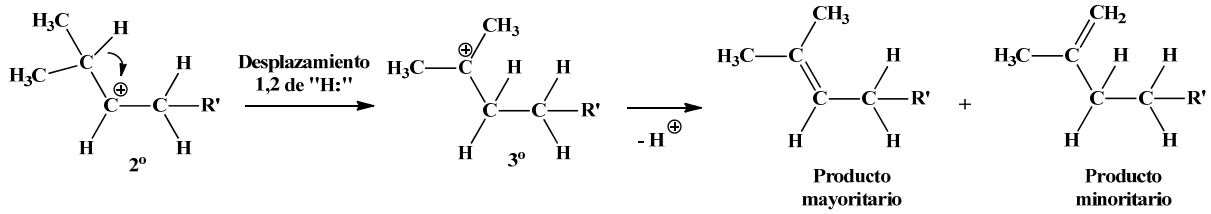


Reordenamientos del carbocatión.

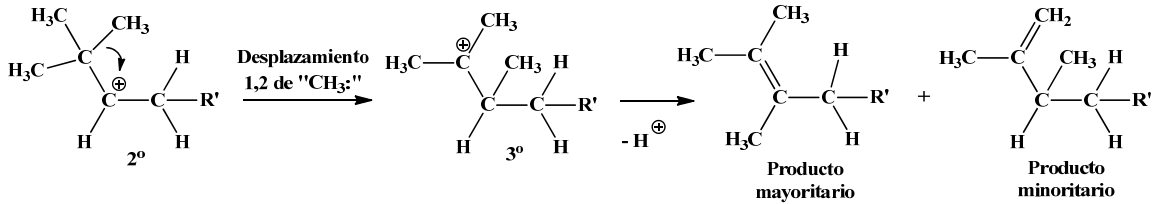
Estabilidad de carbocationes:



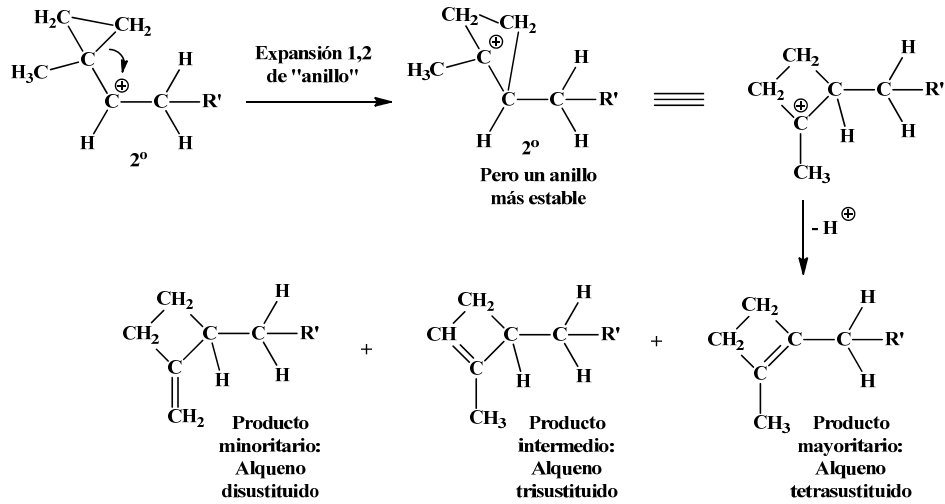
Desplazamiento 1,2 de "H":



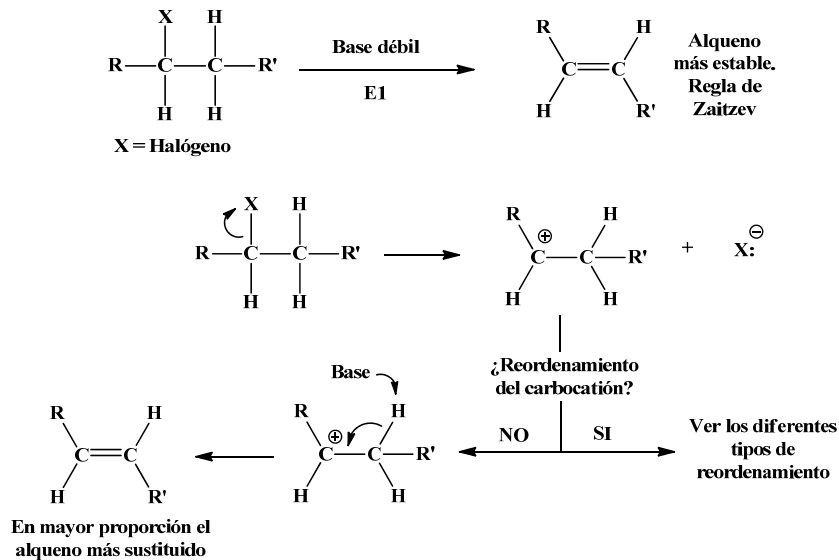
Desplazamiento 1,2 de "CH₃":



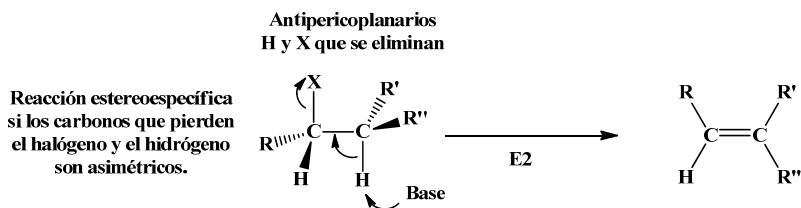
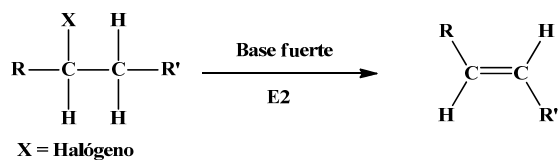
Expansión 1,2 de "anillo":



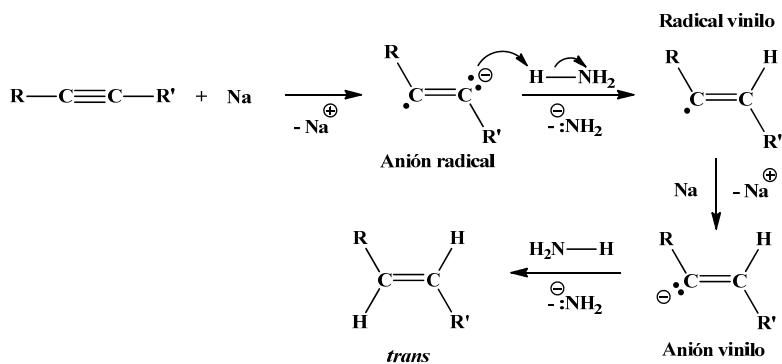
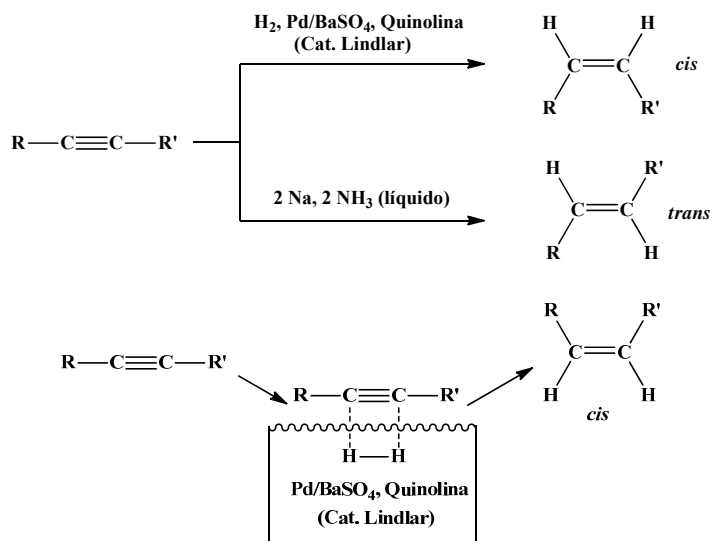
2a. Deshidrohalogenación de haluros de alquilo 3° y 2°.



2b. Deshidrohalogenación de haluros de alquilo 2° y 1°.

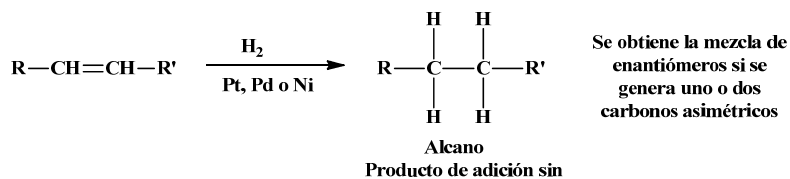


3. Reducción de alquinos.

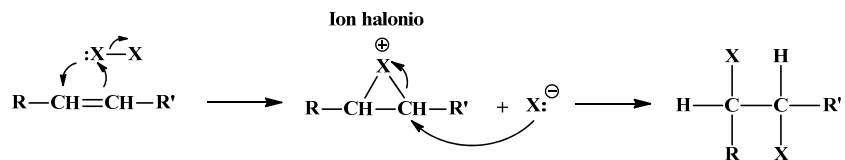
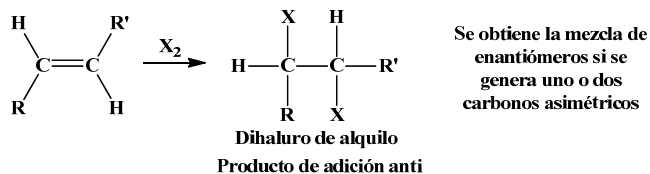


REACCIONES DE ALQUENOS.

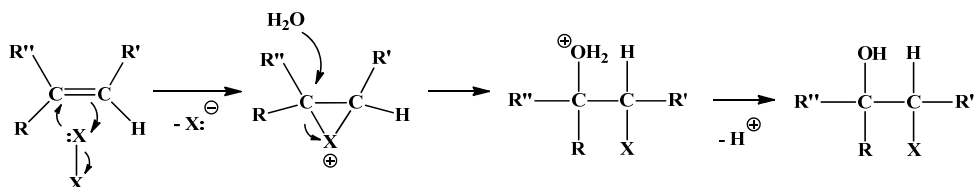
1. Reducción.



2. Adición de halógenos.

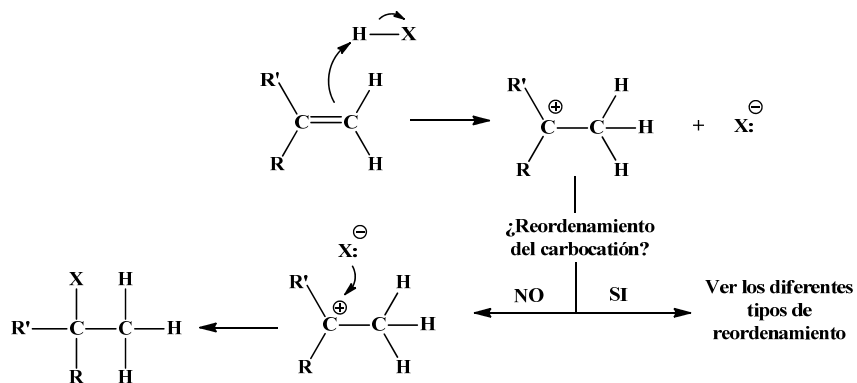
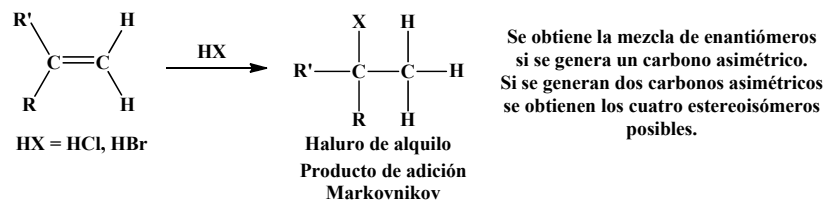


3. Adición de halógenos en presencia de agua.

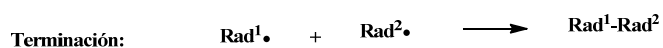
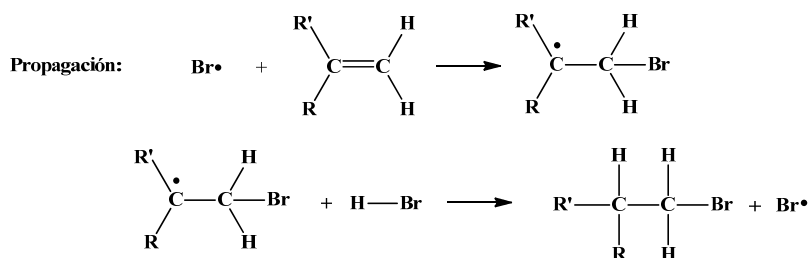
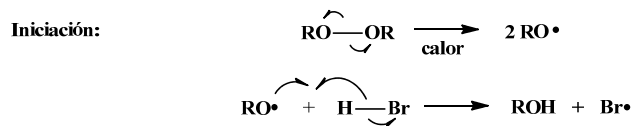
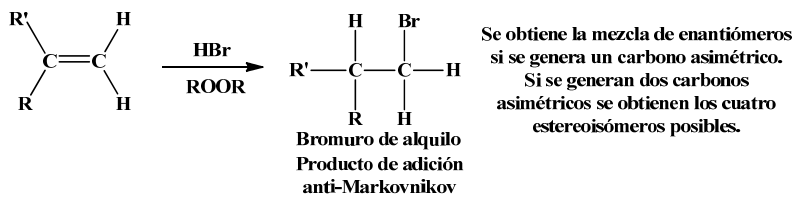


4.a) Adición de haluros de hidrógeno.

La adición de HX sigue la regla de Markovnikov, y con HBr y en presencia de peróxidos se produce una adición anti-Markovnikov.

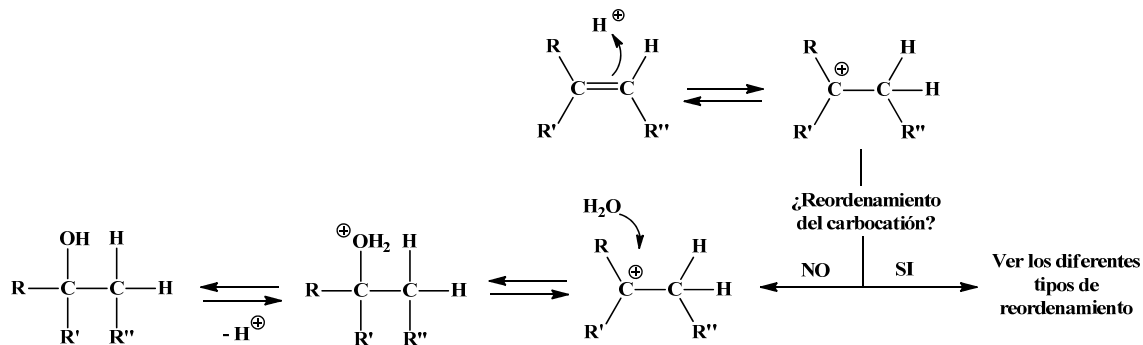


4.b) Adición de bromuro de hidrógeno en presencia de peróxidos.

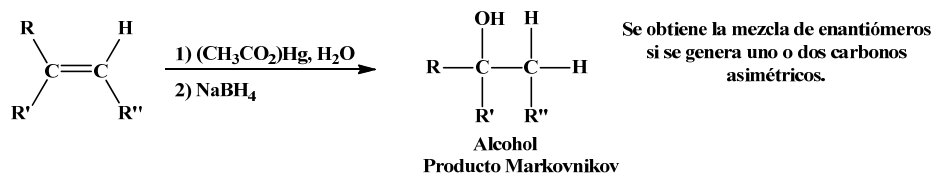


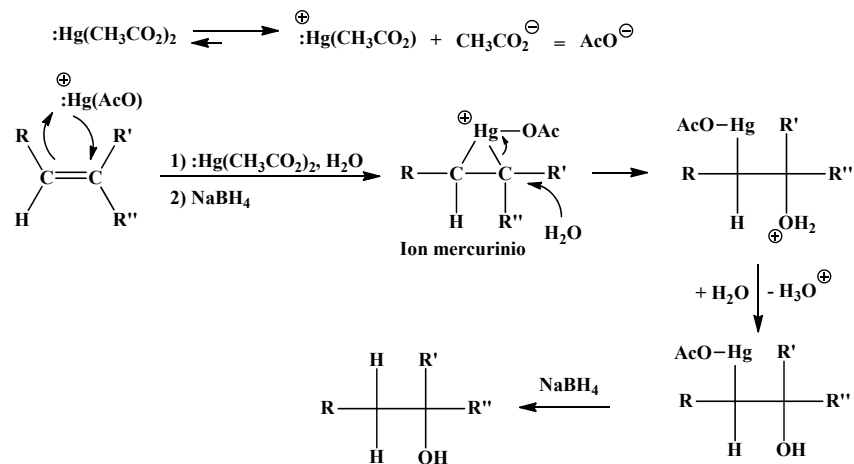
5. Hidratación de alquenos.

a) Adición de agua en medio ácido.

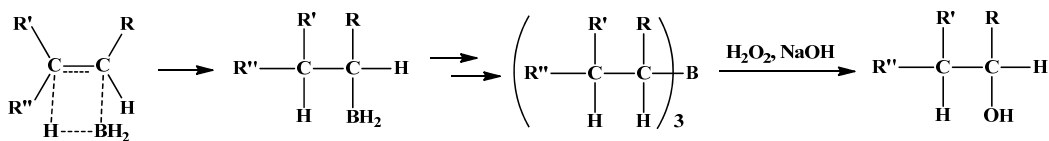
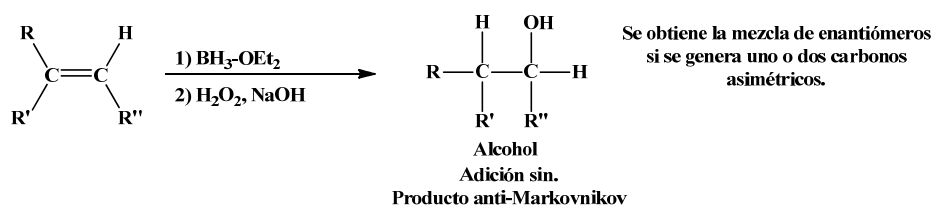


b) Oximercuración-desmercuración.



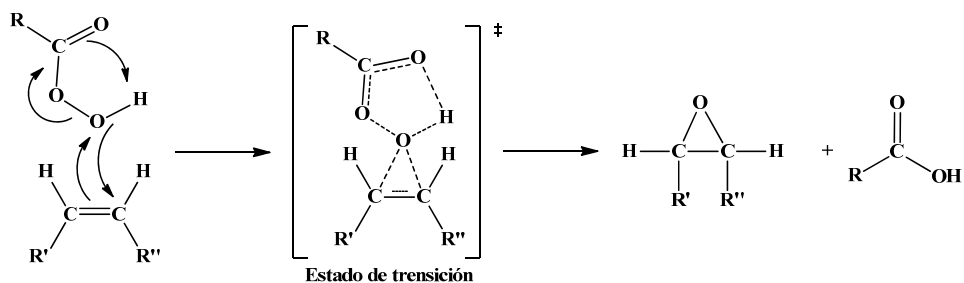
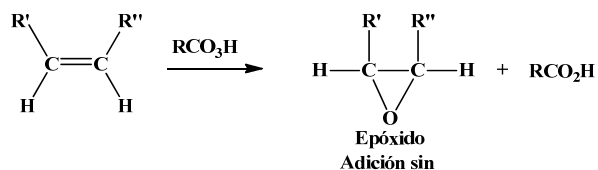


c) Hidroboración-oxidación.

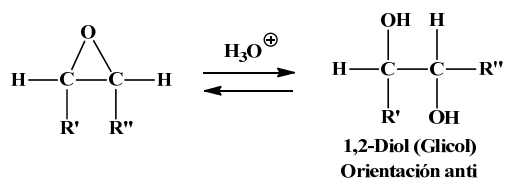


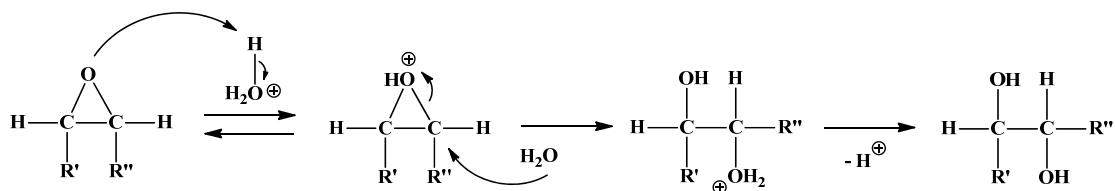
6. Oxidación de alquenos.

a) Epoxidación.

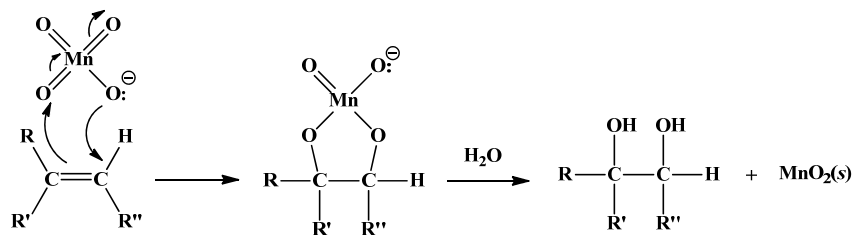
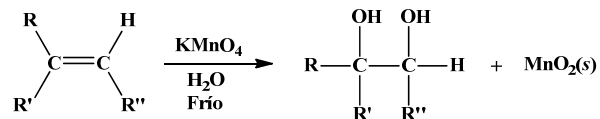


b) Apertura de epóxidos catalizada por ácido.



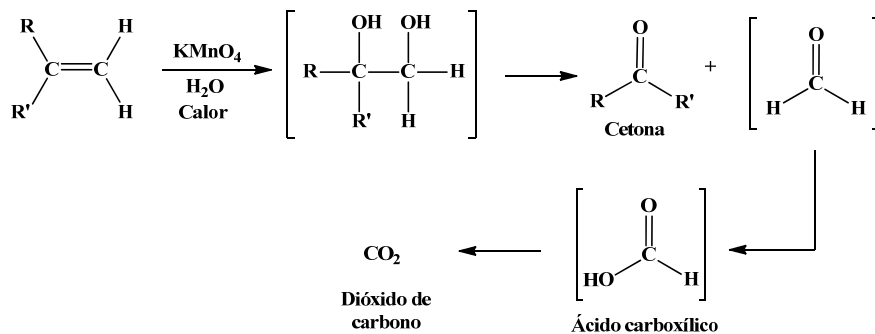
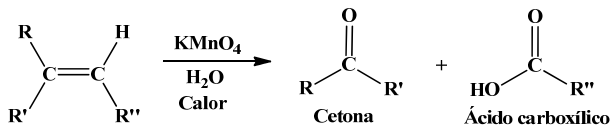
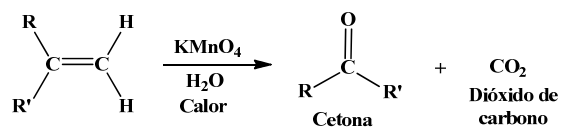


c) Hidroxilación con permanganato diluido en frío.

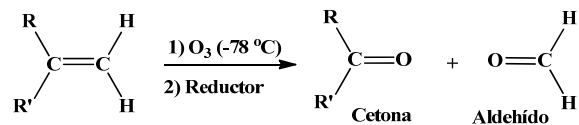


7. Ruptura oxidativa.

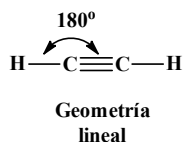
a) Ruptura con permanganato concentrado en caliente.



b) Ozonólisis.



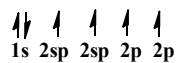
ALQUINOS



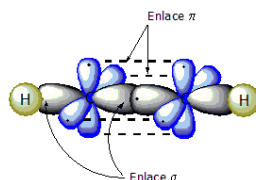
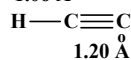
2 enlaces sigma (σ) y 2 enlaces pi (π)

Hibridación sp

Configuración del átomo de carbono en los alquinos:



Distancia del enlace: 1.06 Å



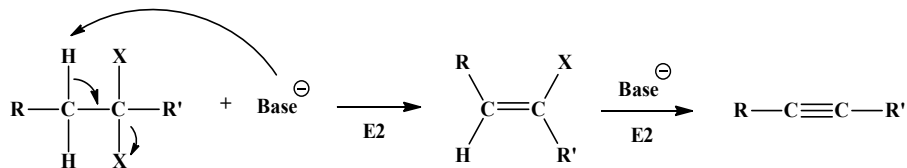
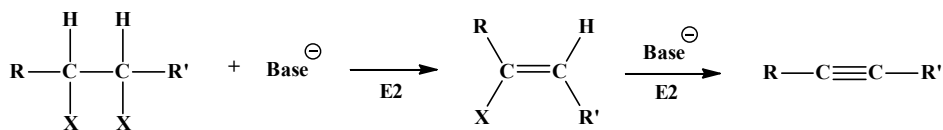
Nomenclatura de alquinos.

Propiedades físicas. Solubilidad, densidad, punto de ebullición y su variación con respecto al número de átomos de carbono y ramificaciones.

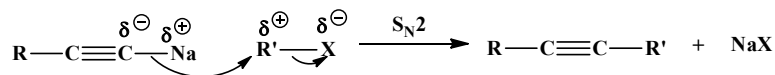
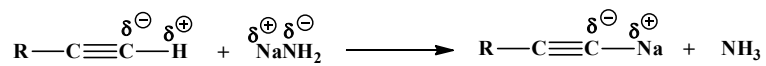
SÍNTESIS DE ALQUINOS.

1. Deshidrohalogenación de dihaluros de alquilo.

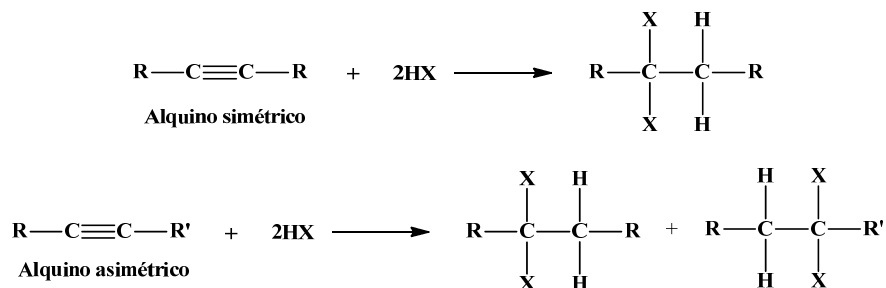
Los dihaluros de alquilo pueden ser vecinales o geminales.



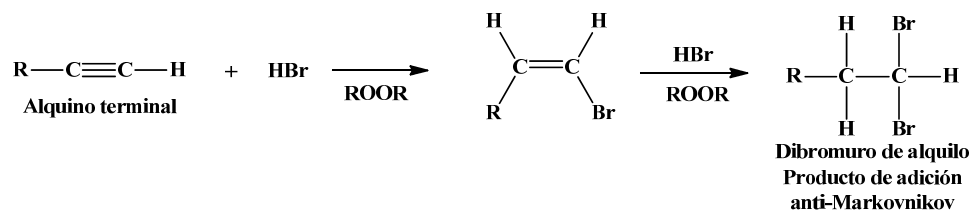
2. Alquilación de iones acetiluro.



Si el alquino es simétrico se obtiene un solo producto. Si es asimétrico se obtienen dos productos.

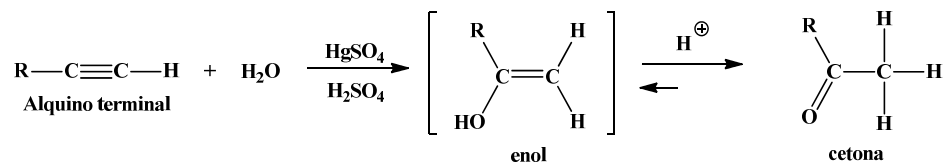


3.b) Adición de bromuro de hidrógeno en presencia de iniciadores de peróxidos.

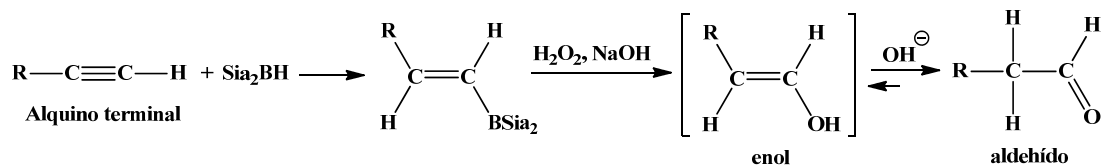


4. Hidratación de alquinos.

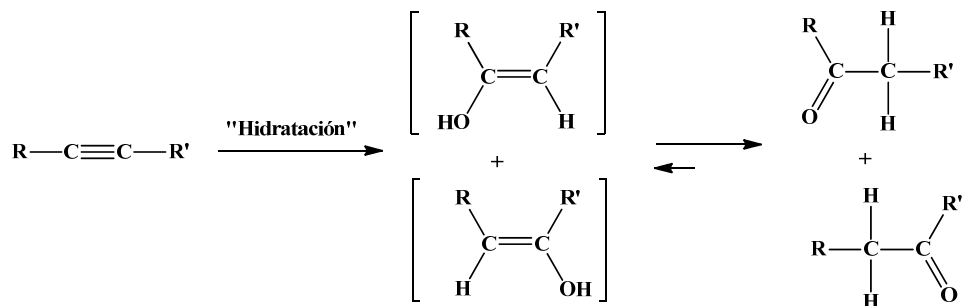
a) Adición de agua catalizada por $\text{HgSO}_4/\text{H}_2\text{SO}_4$.



b) Hidroboración-oxidación.

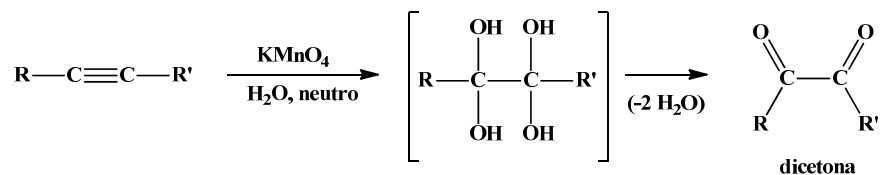
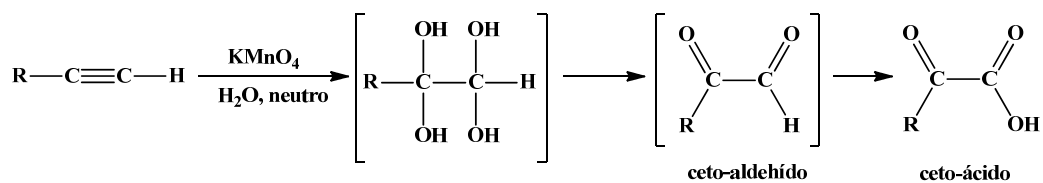


Si se usa un alquino intermedio, los dos métodos dan los mismos productos. Si el alquino es simétrico se obtiene un solo producto, pero si es asimétrico se obtienen dos productos.

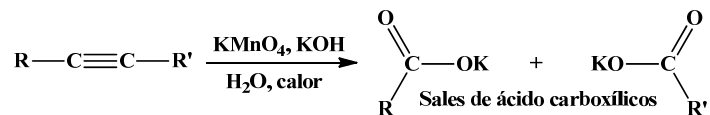
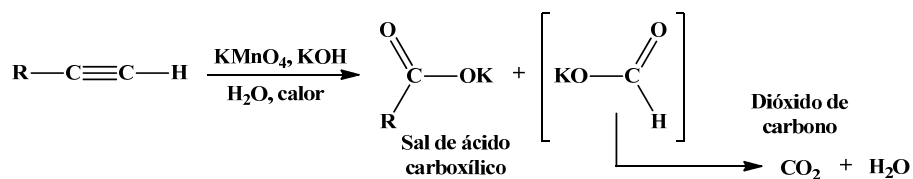


5. Oxidación de alquinos.

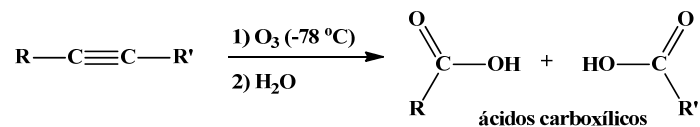
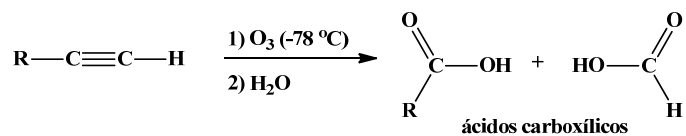
a) Con KMnO_4 en condiciones neutras.

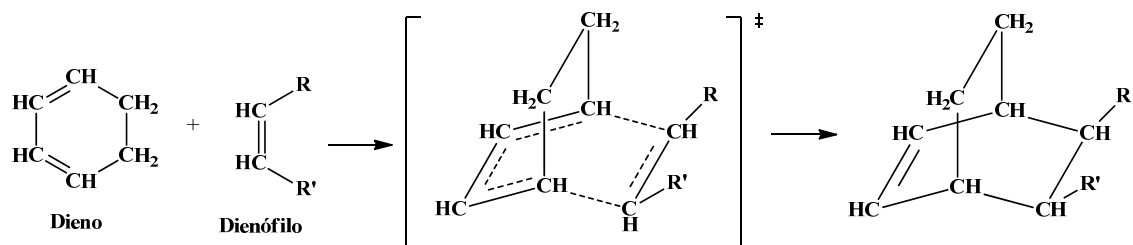
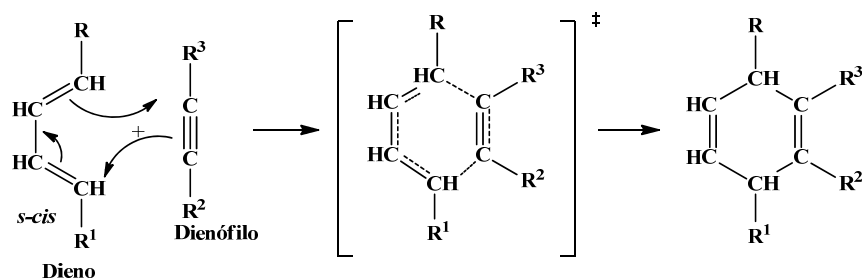
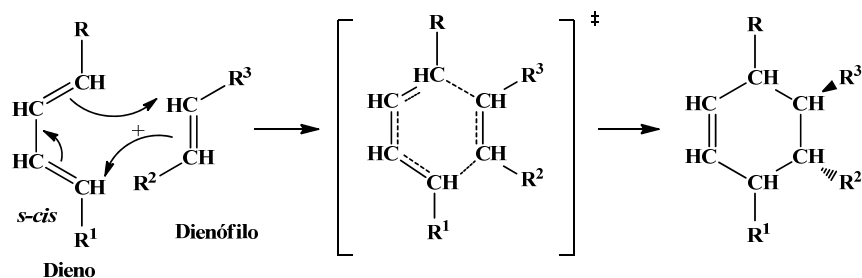
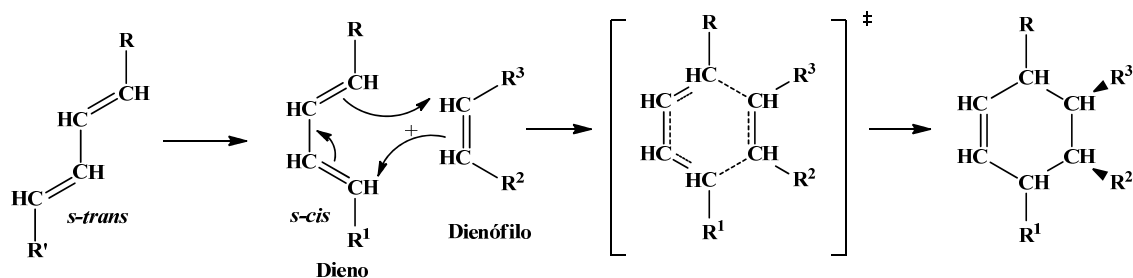


b) Con KMnO_4 en condiciones básicas y calor.



c) Ozonólisis.





4. Polimerización.



BIBLIOGRAFÍA

1. Wade, L. G. Jr.; *Química Orgánica, Vol. 1 y Vol. 2*, 9ª Edición, Pearson Educación, México, 2017.
2. McMurry, J.; *Química Orgánica*, 9ª Edición, Cengage Learning, México, 2017.
3. Bruice, P. Y.; *Química Orgánica*, 5ª Edición, Pearson Prentice Hall, México, 2008.
4. Fox, M. A.; Whitesell, J. K.; *Química Orgánica*, 2ª Edición, Pearson Educación, 2000.
5. Morrison, R. T.; Boyd, R. N.; *Química Orgánica*, 5ª Edición, Pearson Educación, México, 1998.
6. Carey, F. A., Giuliano, R. M.; *Química Orgánica*, 9ª Edición, McGraw-Hill, México, 2014.