FREDY ROMEL PÉREZ AZAHUANCHE
FERNANDO RODRÍGUEZ ÁVALOS

QUÍMICA ORGÁNICA

TEORÍA Y LABORATORIO

Fredy Romel Pérez Azahuanche

Es docente Asociado del Departamento Académico de Ciencias-Facultad de Ciencias de la Salud de la Universidad Privada Antenor Orrego - Trujillo. Ingeniero Químico egresado de la Universidad Nacional de Trujillo. Maestría en Química – Universidad Nacional Mayor de San Marcos. Doctor en Ciencias c/m en Química – Universidad de Concepción – Chile. Desarrolla las líneas de Investigación en Fitoquímica de Plantas medicinales y aplicaciones biológicas, síntesis orgánica de ligandos heterocíclicos, Nitrido complejos metálicos nitrogenantes, polímeros biodegradables. con publicaciones de artículos científicas en revistas indexadas y manuales de laboratorio. Asesor y Jurado de Tesis en las áreas de ciencias de la salud, ciencias básicas y ciencias agrarias. Ha participado como ponente en congresos, seminarios y cursos de química y fitoquímica. Organizador de diferentes actividades de investigación. Cargos administrativos asumidos en la Universidad Privada Antenor Orrego: Secretario Académico de la Facultad de Ciencias de la Salud, Director del Centro de Estudios Preuniversitarios y actualmente Jefe de la Oficina de Investigación.

Fernando Rodríguez Ávalos

Es Ingeniero Químico, egresado de la Universidad Nacional de Trujillo (UNT). Obtuvo su grado de Master of Science en la Universidad de New Hampshire (USA). En la Universidad Inca Garcilaso de la Vega, se graduó como Doctor en Educación. Durante veinte años se desempeñó en la cátedra de Química Orgánica de la Facultad de Ingeniería Química de la UNT. Desde setiembre de 1991, es docente principal de la Universidad Privada Antenor Orrego de Trujillo (UPAO), en la que ha desarrollado las asignaturas de Química General, Química Analítica y Química Orgánica, como integrante de la plana docente del Departamento Académico de Ciencias. Actualmente, es docente de la Escuela Profesional de Ingeniería en Industrias Alimentarias y desarrolla las asignaturas de Análisis de Alimentos, Tecnología de Azúcar y Derivados y Proyecto de Investigación. También, es docente de la Escuela de Posgrado de la UNT. Su línea de investigación se relaciona con estudios fitoquímicos de productos naturales, operaciones y procesos con productos alimenticios. Tiene especial atracción y dedicación por los temas de espectroscopía molecular y de la redacción científica. Ha participado en muchos eventos científico – tecnológicos a nivel regional, nacional e internacional.

FREDY ROMEL PÉREZ AZAHUANCHE
FERNANDO RODRÍGUEZ ÁVALOS

QUÍMICA ORGÁNICA
TEORÍA Y LABORATORIO

FONDO EDITORIAL DE LA UNIVERSIDAD PRIVADA ANTENOR ORREGO

QUÍMICA ORGÁNICA
TEORÍA Y LABORATORIO
© Fredy Romel Pérez Azahuanche y Fernando Rodríguez Ávalos

Primera edición, abril, 2015
Hecho el Depósito Legal en la Biblioteca Nacional del Perú N° 2015-05944
ISBN N°

Editado por:
© UNIVERSIDAD PRIVADA ANTENOR ORREGO
Av. América Sur N° 3145, Urb Monserrate
Central telefónica N° 044-604444, anexo 779
Trujillo, Perú

Impreso en:
Servicios Gráficos del Norte S.A.C.
Jr. Orbegoso N°266, Trujillo, Perú
Teléfono 044-237096

Impreso en el Perú / Printed in Perú

ÍNDICE

1. Estructura, enlace y grupos funcionales

1.1 Introducción 11
1.2 Átomo 11
1.3 Mecánica cuántica 12
1.4 Números cuánticos 12
1.5 Configuración electrónica de los elementos 12
1.6 Enlaces químicos 13
Enlace iónico 13
Enlace covalente 13
1.7 Estructura de Lewis 13
1.8 Electronegatividad y polarización del enlace 14
1.9 Carga formal 16
1.10 Estructuras de resonancia 18
Contribución de las estructuras resonantes 19
Cómo dibujar estructuras resonantes 19
1.11 Teoría de la hibridación 20
Hibridaciones del carbono 20
Hibridaciones del nitrógeno y oxígeno 21
1.12 Grupos funcionales 22
Práctica de aula – estructura de Lewis y grupos funcionales 24

2. Alcanos 29

2.1 Nomenclatura 29
2.2 Grupos alquilos 30
2.3 Nombres de alcanos ramificados 30
2.4 Isómeros 31
2.5 Conformaciones 32
2.6 Tipos de átomos de carbono e hidrógeno 34
2.7 Propiedades físicas 34
2.8 Fuente industrial 36
2.9 Reacciones 36

a. Halogenación 34
b. Mecanismo de halogenación 38
c. Combustión 38
Práctica de aula – alcanos y cicloalcanos 39
3. Alquenos y alquinos 41
3.1 Grupo funcional 41
3.2 Nomenclatura de alquenos 41
3.3 Nomenclatura de alquinos 43
3.4 Isomería geométrica de alquenos 43
3.5 Propiedades físicas 45
3.6 Fuente industrial 46
3.7 Preparación de alquenos 46
3.8 Reacción de alquenos y alquinos 48
Practica de aula – alquenos y alquinos 51
4. Compuestos aromáticos 53
4.1 Introducción 53
4.2 Benceno 53
4.3 Carácter aromático 54
4.4 Nomenclatura de los derivados del benceno 56
4.5 Reacciones del benceno 58
4.6 Mecanismo de reacción 59
Mecanismo de la sustitución electrofílica 59
Práctica de aula – compuestos aromáticos 61
5. Alcoholes 63
5.1 Grupo funcional 63
5.2 Nomenclatura 63
5.3 Fuentes 64
5.4 Propiedades generales 64
5.5 Usos 65
5.6 Reacciones químicas 65
Práctica de aula – alcoholes 67
6. Aldehídos y cetonas 71

6.1 Estructura y propiedades 71
6.2 Nomenclatura 71
Aldehídos 71
Cetonas 72
6.3 Aplicaciones 73
6.4 Reacciones 74
Práctica de aula – aldehídos y cetonas 76
7. Ácidos carboxílicos y derivados 79
7.1 Ácidos carboxílicos 79
7.2 Esteres 81
7.3 Amidas 81
7.4 Reacciones de hidrolisis de esteres y amidas 82
8. Aminas 83
8.1 Nomenclatura 83
8.2 Reacciones de basicidad 84
Práctica de aula sobre ácidos carboxílicos, ésteres, amidas y aminas 85
9. Estereoisometría 89
9.1 Isómeros estructurales 89
9.2 Estereoisómeros 89
9.3 Quiralidad 90
Práctica de aula – isomería óptica 101
10. Carbohidratos 105
10.1 Definición 105
10.2 Clasificación 105
10.3 Monosacáridos 105
10.4 Ciclación de los monosacáridos 106
10.5 Formación de glicósidos 107
10.6 Principales disacáridos 107
10.7 Principales polisacáridos 109
10.8 Reacciones químicas 109
Práctica de aula – carbohidratos 110

11. Proteínas 113

11.1 Definición 113

11.2 Los aminoácidos 113

11.3 Propiedades de los aminoácidos 115

11.4 Péptidos 115

11.5 Estructura de las proteínas 116

Estructura primaria 116

Estructura secundaria 117

Estructura terciaria 117

Estructura cuaternaria 118

11.6 Propiedades de las proteínas 119

Solubilidad 119

Capacidad amortiguadora 119

Desnaturalización y renaturalización 119

Especificidad 119

Práctica de aula – aminoácidos, péptidos y proteínas 120

12. Lípidos 123

12.1 Definición 123

12.2 Funciones 124

12.3 Clasificación 124

12.4 Ácidos grasos 125

Propiedades 125

12.5 Lípidos simples 126

Triglicéridos 126

Ceras 127

12.6 Lípidos complejos 127

Fosfolípidos 127

Glucolípidos 129

12.7 Lípidos insaponificables 129

Terpenos 129

Esteroides 129

Prostaglandinas 131

Practica de aula - lípidos 131

PRÁCTICAS EXPERIMENTALES

Medidas ambientales y de seguridad en el laboratorio 133

Práctica 1 Separación de una mezcla binaria - extracción discontinua 135

Práctica 2 Cromatografía 139

Práctica 3 Destilación por arrastre con vapor 143

Práctica 4 Modelos moleculares 146

Práctica 5 Espectroscopia infrarroja 151

Práctica 6 Síntesis de cloruro de t-butilo 154

Práctica 7 Síntesis de acetato de etilo 159

Práctica 8 Estereoisomería 163

Práctica 9 Carbohidratos 165

Práctica 10 Aminoácidos y Proteínas 169

Anexo

Nomenclatura de compuestos orgánicos 177

Bandas de absorción IR de funciones orgánicas más comunes 211

Bibliografía general 248

PRESENTACIÓN

El presente texto expone de manera específica los conceptos fundamentales de química orgánica, tomando como referencia textos universitarios de autores reconocidos, información de internet y aportes de los autores, complementados con ejercicios denominados prácticas de aula.

También se ha incluido la sección de laboratorio que presenta los métodos y técnicas de separación más comunes de química orgánica, espectroscopía IR, síntesis orgánica y ensayos colorimétricos.

Se pretende, con este texto, la comprensión progresiva y rápida de esta apasionante y amplia ciencia de la Química Orgánica.

Los autores

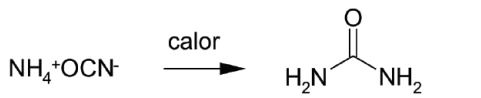
1. Estructura, enlace y grupos funcionales

1.1 Introducción

La química orgánica es la ciencia que estudia a los compuestos del carbono y sus derivados.
En 1807, J. J. Berzelius empleó por primera vez el término "compuesto orgánico" y lo asoció a las sustancias elaboradas por los seres vivos, en tanto que que los compuestos inorgánicos eran asociados a los seres inanimados.

Inicialmente se pensó que los compuestos orgánicos no podían ser sintetizados en el laboratorio, lo que motivó la denominada Teoría del Vitalismo.

En 1828, Friedrich Wöhler realizó la siguiente síntesis en el laboratorio:



cianato de amonio (compuesto inorgánico) — urea (compuesto orgánico)

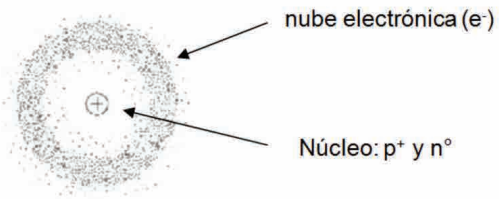
Con este descubrimiento se inició la Síntesis de Compuestos Orgánicos en laboratorio y el destierro de la teoría del vitalismo.

El desarrollo de la Teoría Estructural, la Mecánica Cuántica, Técnicas de Síntesis y equipos, han permitido el desarrollo de la Química Orgánica. Como consecuencia de ello, se ha logrado sintetizar una diversidad de compuestos, tales como: fármacos, polímeros, insecticidas, preservantes de alimentos, colorantes, detergentes, hormonas, feromonas, etc. de amplio uso para el ser humano.

Sin embargo, también es necesario destacar que muchos de esos compuestos han demostrado ser dañinos para nuestro sistema ecológico, como los detergentes, insecticidas y refrigerantes de freón. Por lo que la síntesis de compuestos orgánicos debe realizarse siempre tomando como referencia la variable ecosistema.

1.2 Átomo

El átomo es la unidad fundamental de la materia. Fundamentalmente está formado por dos regiones: la nube electrónica y el núcleo.



1.3 Mecánica cuántica

La descripción del electrón en la nube electrónica se determina mediante la Ecuación de onda de Erwin Schrödinger, cuyas soluciones llamadas funciones de onda (ψ), dependen de ciertos parámetros llamados números cuánticos.

$$\frac{\delta^2\psi}{\delta x^2} + \frac{\delta^2\psi}{\delta y^2} + \frac{\delta^2\psi}{\delta z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \cdot [E(\psi) - V(\psi)] = 0$$

ψ: función de onda

m: masa del electrón

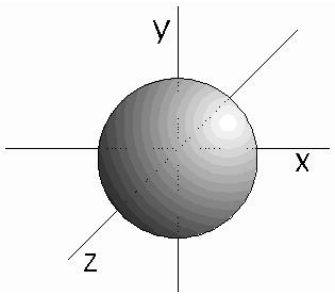
h: constante de Planck

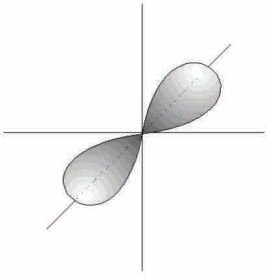
E: energía total del electrón (depende de sus coordenadas x, y z)

V: energía potencial del electrón (depende de sus coordenadas x, y, z)

1.4 Números cuánticos

Son cuatro y permiten dividir la nube electrónica en niveles, subniveles y orbitales. El orbital, es la región del espacio con mayor probabilidad de encontrar a un electrón. Los orbitales tiene formas geométricas definidas; así, el orbital "s" tiene la forma de una esfera y el orbital "p" es bilobular.





1.5 Configuración electrónica de los elementos

Se basa en los principios de Aufbau (orden de los subniveles); exclusión de Pauli (capacidad máxima de un orbital dos electrones y con espines opuestos) y máxima multiplicidad de Hund (orbitales de igual energía todos con un electrón antes de completar con dos).

El orden de los subniveles es:
1s, 2s 2p, 3s 3p, 4s 3d 4p, 5s 4d 5p, 6s 4f 5d 6p, 7s 5f 6d 4f

Ejemplos: Determinar la configuración electrónica del ${}_6C$, ${}_7N$, ${}_8O$ y ${}_9F$

${}_6C = 1s^2\,2s^2\,2p^2$
${}_7N = 1s^2\,2s^2\,2p^3$
${}_8O = 1s^2\,2s^2\,2p^4$
${}_9F = 1s^2\,2s^2\,2p^5$

1.6 Enlace químico

Es la fuerza de naturaleza eléctrica que mantiene unido a los átomos en un compuesto.

Enlace iónico
Se forma cuando los átomos unidos han transferido completamente sus electrones, transformándose en especies con carga (iones), los cuales se atraen por su diferencia de cargas; ion positivo (catión), ion negativo (anión).

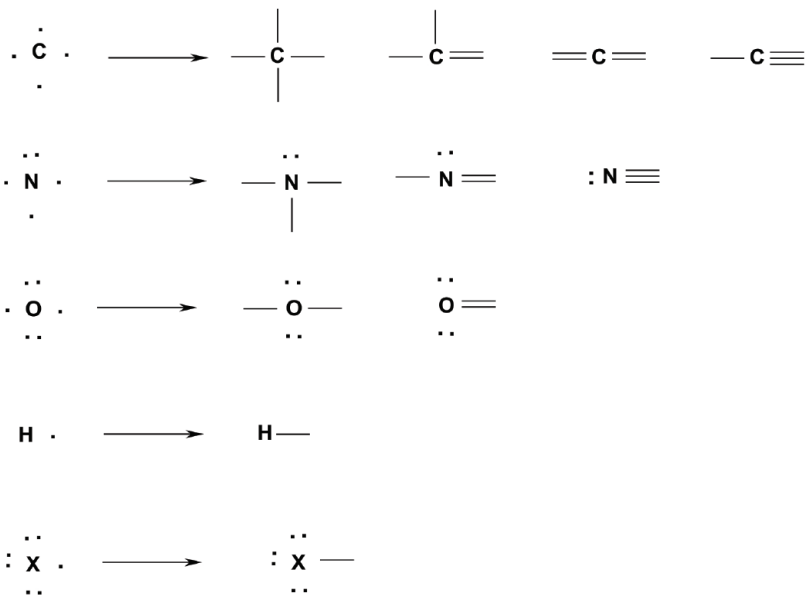
Este tipo de enlace se forma cuando se une un metal y un no metal. Ejemplo: NaCl, KOH, $CuCl_2$

Enlace covalente
Se forma cuando los átomos comparten sus electrones. Este tipo de enlace se forma cuando se unen no metales. Ejemplo, H_2O, Cl_2, NH_3

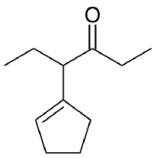
G. N. Lewis observó que los átomos se unen mediante enlaces químicos para completar 8 electrones en su capa de valencia (Regla del Octeto), con excepción del H, que lo hace con dos electrones.

1.7 Estructuras de Lewis

Las estructuras de Lewis muestran cómo los diferentes átomos en un compuesto están conectados entre sí. Para el desarrollo de las estructuras de Lewis es necesario tener en claro que el C, N, O, H y X (halógenos) forman un determinado número de enlaces de acuerdo a los electrones de su capa de valencia:



Ejemplo: Formular la estructura de Lewis de los siguientes compuestos:

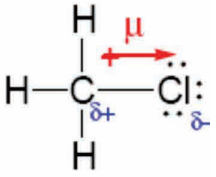
a) CH_3-CH=CH-CH_2CH_3 b) $CH_2CCHCH_2COOCH_3$ c) 

Las estructuras de Lewis no muestran la forma geométrica de la molécula ni los ángulos de enlace, por lo que el enlace químico entre átomos es complementado con las Teorías del Enlace en la Capa de Valencia y de la Hibridación.

1.8 Electronegatividad y polarización del enlace

Cuando dos átomos comparten por igual los dos electrones del enlace covalente se dice que el enlace es **no polar**, como ocurre en el enlace covalente de la molécula de hidrógeno, en el enlace covalente de la molécula de cloro, o en el enlace covalente carbono-carbono del etano. Sin embargo, la mayor parte de los enlaces covalentes están formados por dos átomos diferentes, de manera que los electrones son atraídos con mayor intensidad por uno de los dos átomos que forman el enlace.

Cuando esto ocurre, el enlace covalente se denomina **enlace polar**. Por ejemplo, cuando el carbono se enlaza al cloro el par de electrones del enlace se encuentra atraído con más intensidad por el átomo de cloro, de manera que sobre el átomo de carbono aparece una pequeña carga parcial positiva y sobre el átomo de cloro aparece una cantidad igual de carga negativa. En la siguiente figura se indica el enlace covalente polar C-Cl de la molécula de clorometano. La polaridad del enlace se indica con una flecha que dirige su punta hacia el extremo negativo del enlace polar y un signo más (+) en el extremo positivo del enlace.



La polaridad del enlace se mide mediante su **momento dipolar** (μ), que se define como la cantidad de diferencia de carga multiplicada por la longitud del enlace. El símbolo δ^+ quiere decir una pequeña cantidad de carga positiva y el símbolo δ^- quiere decir una pequeña cantidad de carga negativa.

A fin de predecir si un enlace covalente es polar se recurre a la comparación de las electronegatividades de los átomos que forman el enlace. La **electronegatividad** se define como la tendencia del núcleo atómico a la atracción de electrones.

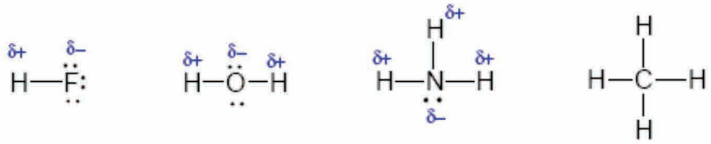
Pauling desarrolló una escala de electronegatividades relativas para la mayoría de los átomos. En el Sistema Periódico, la electronegatividad aumenta de izquierda a derecha y disminuye al bajar en una columna, por lo que el flúor es el elemento más electronegativo. A continuación

se da una tabla de electronegatividades para átomos de interés en Química Orgánica.
Como se deduce de la tabla anterior, un enlace C-H debería estar muy poco polarizado, puesto que la electronegatividad del hidrógeno y del carbono es similar.

Sin embargo, los halógenos, el oxígeno y el nitrógeno, son átomos que suelen aparecer en

H 2.2						
Li 1.0	Be 1.6	B 1.8	C 2.5	N 3.0	O 3.4	F 4.0
Na 0.9	Mg 1.3	Al 1.6	Si 1.9	P 2.2	S 2.6	Cl 3.2
						Br 3.0
						I 2.7

las estructuras orgánicas, son más electronegativos que el carbono y, por tanto, los enlaces C-halógeno, C-O y C-N son polares. A continuación se representan las estructuras de Lewis de las moléculas de fluoruro de hidrógeno (HF), agua (H_2O) y amoníaco (NH_3), con indicación de la polaridad de los enlaces. La molécula de metano se puede considerar que está constituida por enlaces C-H muy poco polarizados.



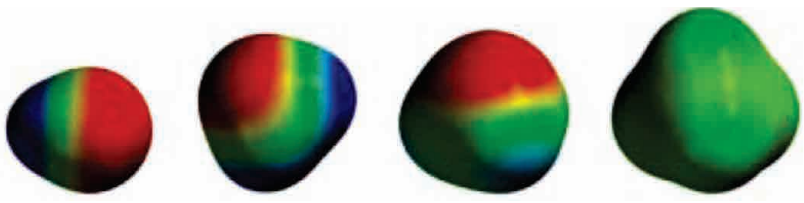
fluoruro de hidrógeno | agua | amoniaco | metano

En algunos temas de esta asignatura, se representará el contorno de densidad electrónica de determinadas moléculas. La asimetría en la distribución de carga se indica con un sistema de colores que varía de tonalidad según el valor del potencial electrostático: el color rojo indica una zona de la estructura con elevada densidad de carga negativa, debido a presencia de átomos muy electronegativos, en tanto que el color azul indica una zona de la estructura con baja densidad de carga, debido a la presencia de átomos con baja electronegatividad. En la siguiente figura se muestra esta variación del color respecto al signo del potencial:

rojo < naranja < amarillo < verde < azul

potencial electrostático más negativo — **potencial electrostático más positivo**

En la siguiente figura se muestran los contornos de potencial electrostático de HF, H_2O, NH_3 y CH_4.



HF H_2O NH_3 CH_4

El enlace H-F está fuertemente polarizado y la densidad de carga a lo largo del enlace entre el flúor y el hidrógeno está desplazada hacia el átomo más electronegativo (flúor), creando un potencial electrostático negativo alrededor de dicho átomo (color rojo) y, en consecuencia, un potencial electrostático positivo alrededor del hidrógeno (color azul).

Lo mismo ocurre en el caso de la molécula de agua, en el que la mayor electronegatividad del oxígeno provoca la polarización de los enlaces O-H.

El caso del amoníaco es similar al de la molécula de agua. El nitrógeno es más electronegativo que el hidrógeno y, por tanto, los tres enlaces N-H son polares. La densidad de carga se halla desplazada hacia el nitrógeno, lo cual se ve perfectamente en el diagrama de contorno de potencial electrostático por la aparición de una zona de color rojo en la parte superior de la figura (posición del nitrógeno) y la aparición de una zona de color azul en la parte inferior donde se encuentran los tres átomos de hidrógeno.

Por último, en el metano no existen enlaces polares debido a la similar electronegatividad del átomo de carbono y el de hidrógeno. La distribución simétrica de la densidad de carga conlleva la aparición de un potencial electrostático más bien neutro (verde) alrededor de todos los átomos de la molécula.

1.9 Carga formal

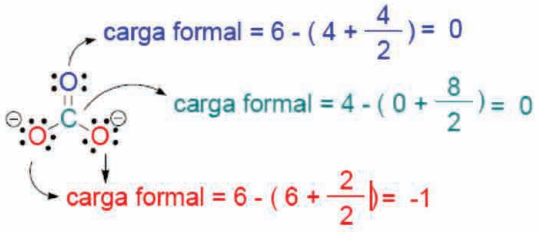
En los enlaces polares las cargas parciales sobre los átomos son reales. Sin embargo, cuando se dibujan determinadas estructuras químicas según la representación de Lewis, aparecen cargas eléctricas asociadas a algunos átomos, denominadas **cargas formales**. Las cargas formales permiten contar el número de electrones de un átomo determinado de una estructura y se calculan según la siguiente ecuación:

$$\text{Carga formal} = \text{nº electrones capa de valencia} - \left(\text{nº electrones no compartidos} + \frac{\text{nº electrones enlazantes}}{2}\right)$$

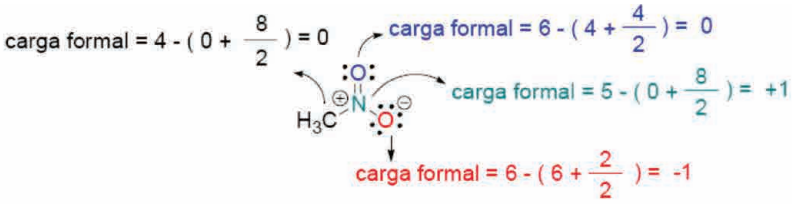
A continuación se muestran las estructuras de Lewis del anión carbonato y del nitrometano. Se aprecia que sobre dos de los átomos de oxígeno del anión carbonato aparecen una carga formal negativa y en la molécula de nitrometano aparece una carga formal positiva sobre el átomo de nitrógeno y una carga parcial negativa sobre uno de los dos átomos de oxígeno.

Anión carbonato | Nitrometano

En la siguiente figura, se indica el cálculo de la carga formal de cada uno de los átomos que integran el anión carbonato:

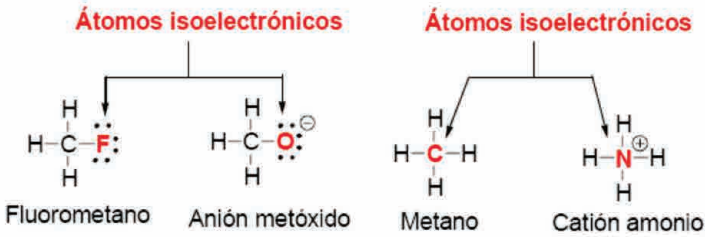


El mismo cálculo se indica a continuación para los átomos, excepto H, que componen la molécula de nitrometano:



Algunas moléculas orgánicas, aunque eléctricamente neutras, están compuestas en realidad por átomos con cargas formales neutralizadas entre sí, como se acaba de ver en el caso del nitrometano.

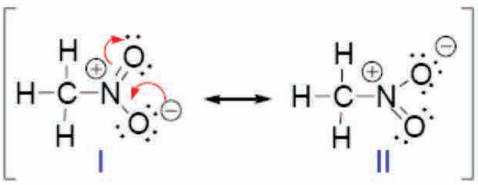
Dos átomos diferentes que poseen la misma configuración electrónica en la capa de valencia, aunque posean distinta carga formal, se denominan isoelectrónicos. Por ejemplo, el átomo de fluor del fluorometano y el átomo de oxígeno del anión metóxido son átomos isoelectrónicos, al igual que el átomo de carbono del metano y el átomo de nitrógeno del catión amonio.



1.10 Estructuras de resonancia

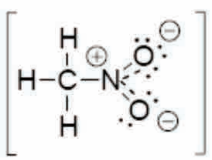
Algunas moléculas orgánicas se pueden representar mediante dos o más estructuras de Lewis, que difieren entre sí únicamente en la distribución de los electrones, que se denominan **estructuras resonantes**. En estos casos, la molécula tendrá características de ambas estructuras y se dice que la molécula es un **híbrido de resonancia** de las estructuras resonantes. El método de la resonancia permite saber, de forma cualitativa, la estabilización que puede conseguir una molécula por deslocalización electrónica. Cuanto mayor sea el número de estructuras resonantes, mediante las cuales se pueda describir una especie química, mayor será su estabilidad.

El concepto de estructuras resonantes se puede aplicar en la descripción del nitrometano, que se puede representar mediante las dos estructuras de Lewis que se indican a continuación:



Estructuras resonantes del nitrometano

En realidad, el nitrometano no es la estructura resonante I ni tampoco la estructura resonante II, sino la estructura que resultaría al mezclar las características asociadas a la estructura I y a la II, tal y como se indica a continuación:



Híbrido de resonancia del nitrometano

El problema de dibujar los compuestos orgánicos como híbridos de resonancia reside en la imposibilidad de contar el número de electrones sobre algunos átomos.

Por ejemplo, en la estructura de híbrido de resonancia del nitrometano se hace difícil saber el número de electrones sobre el átomo de nitrógeno o sobre los átomos de oxígeno. Aunque los híbridos de resonancia dan una imagen más real del orden de enlace y de la distribución electrónica de la molécula no se suelen utilizar con asiduidad. Una forma de escribir el híbrido de resonancia, que sí permite contar los electrones en cada átomo, consiste en encerrar entre corchetes todas las estructuras resonantes, conectándolas entre sí mediante una flecha de doble punta, tal como se ha descrito más arriba.

Contribución de las estructuras resonantes

La mayor o menor contribución de las estructuras resonantes a la descripción de la molécula se puede relacionar con la mayor o menor estabilidad que teóricamente puede atribuirse a cada estructura. De forma cualitativa, se puede evaluar esta mayor o menor estabilidad teniendo en cuenta los siguientes puntos:

1. Una estructura resonante será tanto más estable cuanto mayor sea el número de enlaces formales que posea.
2. Las estructuras iónicas con separación de cargas son más inestables que las no cargadas.
3. Entre dos estructuras resonantes con separación de cargas, y en igualdad de otras condiciones, será más estable la estructura con la carga negativa en el átomo más electronegativo.
4. Las estructuras resonantes con octetos completos en todos los átomos de la segunda fila del sistema periódico son particularmente estables, aunque ello suponga la presencia de una carga positiva en un átomo electronegativo.

Cómo dibujar estructuras resonantes

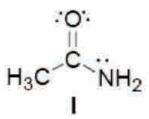
Para dibujar correctamente las estructuras resonantes de un compuesto conviene seguir las siguientes reglas:

1. Dibujar una estructura de Lewis para el compuesto en cuestión.
2. Tomando como base la estructura de Lewis acabada de dibujar se dibuja otra estructura de Lewis de manera que:

   a) Todos los núcleos mantengan su posición original.
   b) Se mantenga el mismo número de electrones apareados.

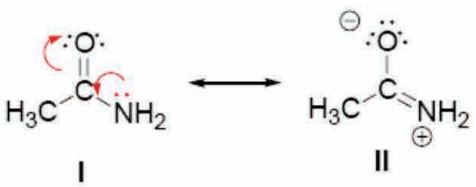
A continuación, se aplican estas reglas para el dibujo de las estructuras resonantes de la acetamida:

1. Se dibuja la estructura de Lewis de la acetamida.



I

2. Tomando como base la estructura de Lewis, se dibuja otra estructura de Lewis que mantenga los núcleos en la misma posición y que contenga el mismo número de electrones apareados que la primera, tal como se indica a continuación.



I II

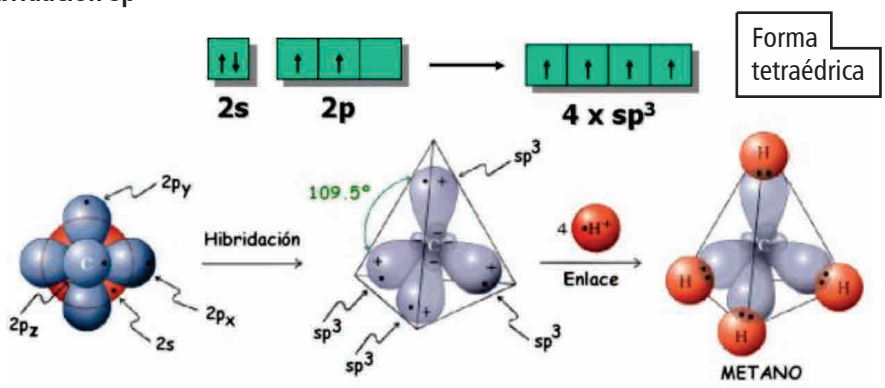
El método de las estructuras resonantes permite describir a la acetamida como un híbrido de resonancia entre las estructuras resonantes I y II. De las dos estructuras resonantes, la que contribuye en mayor proporción en la composición del híbrido de resonancia es la I, porque tiene un mayor número de enlaces y porque no contiene separación de cargas. Sin embargo, la estructura resonante II, aunque contribuye poco en la determinación de las propiedades físicas y químicas de la acetamida, muestra que el enlace C-N debe tener un cierto carácter de doble enlace, como así ocurre en realidad.

1.11 Teoría de la hibridación

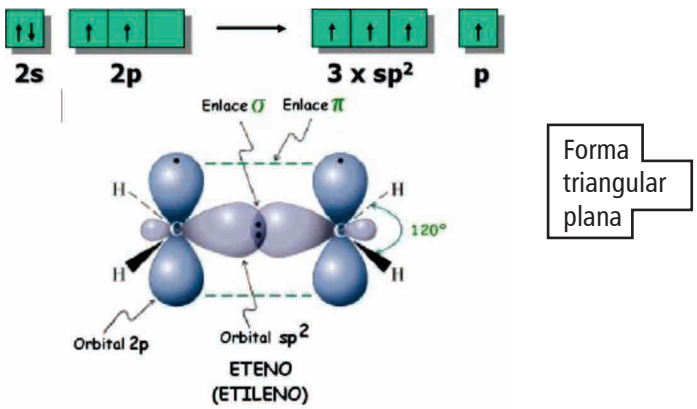
Establece que los átomos, antes de formar enlaces químicos con otros átomos, combinan sus propios orbitales atómicos entre sí, generando nuevos orbitales llamados orbitales híbridos, los cuales tienen orientaciones espaciales y formas geométricas definidas.

Hibridaciones del carbono

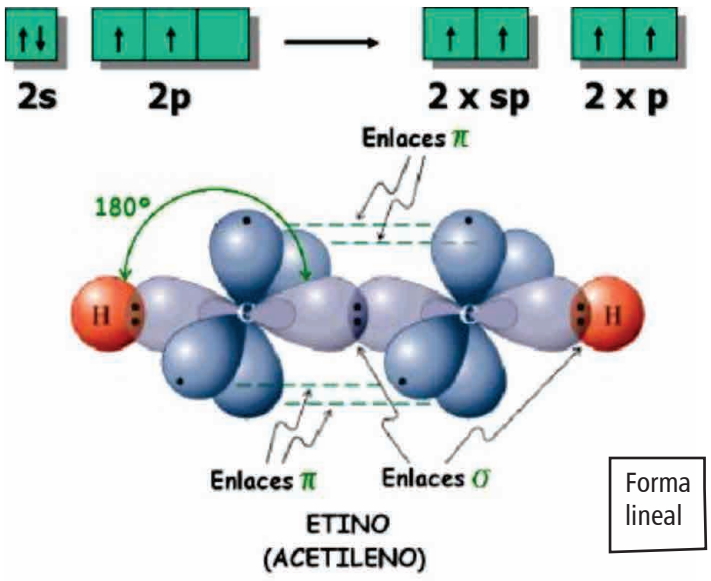
Hibridación sp^3



Hibridación sp^2

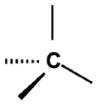
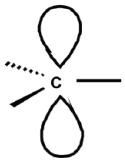
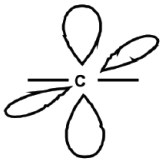
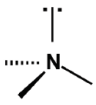
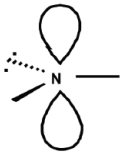
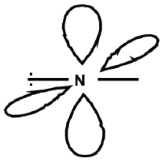
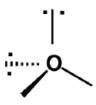
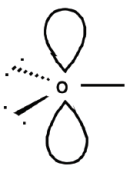


Hibridación sp



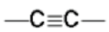
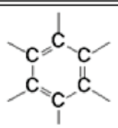
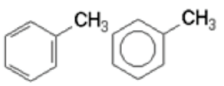
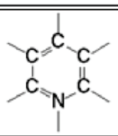
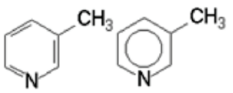
Hibridaciones del nitrógeno y oxígeno

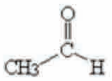
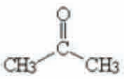
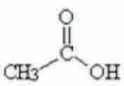
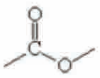
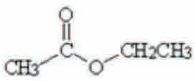
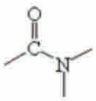
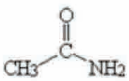
El nitrógeno y el oxígeno tienen similar hibridación, lo que podría resumirse en:

Hibridación	sp^3	sp^2	sp
C			
N			
O			
Tipo de enlace	simple	doble	triple o dos dobles

1.12 Grupos funcionales

Son átomos o grupos de átomos que caracterizan a una función química orgánica

Clase	Grupo funcional	Ejemplo
alcanos		CH_3-CH_3
alquenos		$CH_3CH{=}CH_2$
alquinos		CH_3-C≡C-CH_3
(homo) aromáticos		
(hetero) aromáticos		
haluros de alquilo	-halógeno	CH_3-CH_2-Br
alcoholes fenoles	-OH	CH_3-CH_2-OH Ph-OH
éteres	-O-	CH_3-CH_2-O-CH_2-CH_3
aminas primarias	-NH_2	CH_3-NH_2

aminas secundarias	-NH-	$(CH_3)_2NH$
aminas terciarias		$(CH_3)_3N$
aldehídos		
cetonas		
ácidos carboxílicos		
ésteres		
amidas		
nitrilos	-C≡N	CH_3CN

Práctica de aula - estructuras de Lewis

Formular la estructura de Lewis (línea-punto) de cada uno de los siguientes compuestos:

a) CH_3-CH=CH-CH=CH_2

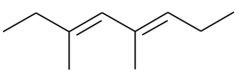
b) $(CH_3)_2$CH-CHCl-CH=CH_2

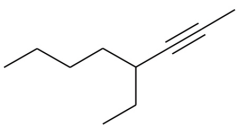
c) CH_3-C$\equiv$C - CH_2-CH_3

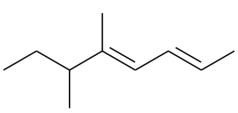
d) $CHCCH_2CHC(CH_3)_2$

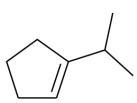
e) $(CH_3)_3CCCCH_2CH_3$

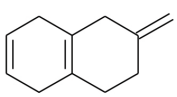
f) $(CH_2CH)_2CCHCH_2CHCH_2$

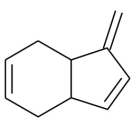
g) 

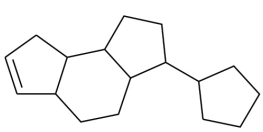
h) 

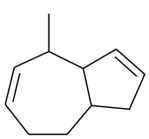
i) 

j) 

k) 

l) 

m) 

n) 

Práctica de aula - hibridación

Determinar la hibridación del C, N y O en los siguientes compuestos:

a) $CH_3CHCCHCOCH_3$

b) $CH{\equiv}CCHCl_2$

c) $CH_3COCH{=}CHCHO$

d) $CH_3CClCHCH(CH_3)_2$

e) $CH_3CH{=}CHCON(CHCH_2)_2$

f) $CH_3CHBrCOOCHCH_2$

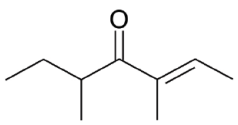
g) $(CH_3)_2C{=}C(CH_3)_2$

h) $CH_3CONHCH_2CH_3$

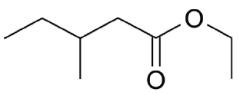
i) $CH_3CH_2NHCH_3$

j) CH_2CHCH_2CN

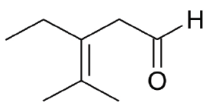
k)



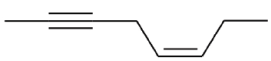
l)



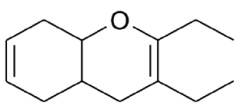
m)



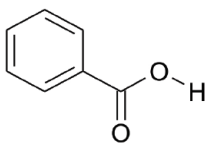
n)



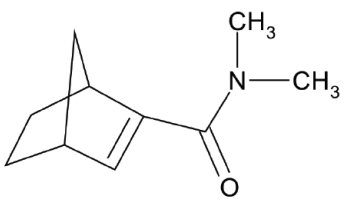
o)



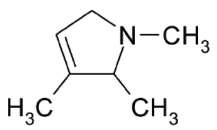
p)



q)



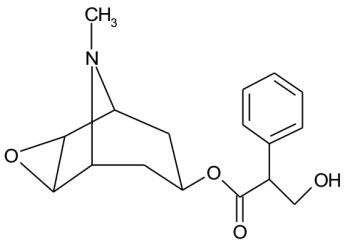
r)



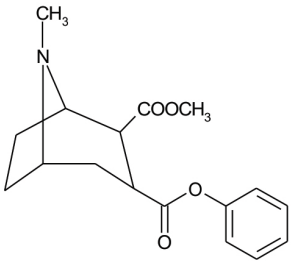
Práctica de aula – grupos funcionales

Encerrar los compuestos siguientes con un círculo los grupos funcionales y escribir la función orgánica que le corresponde.

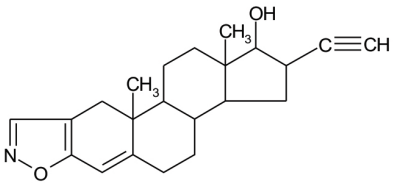
a) Escopolamina



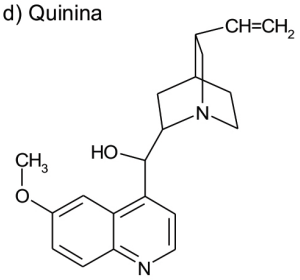
b) Cocaina



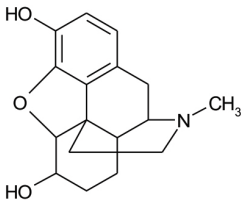
c) Danazolt danocrine



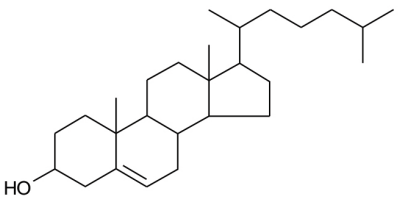
d) Quinina



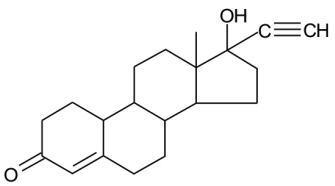
e) Morfina



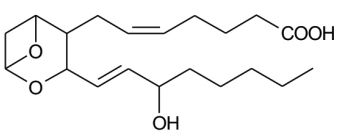
f) Colesterol



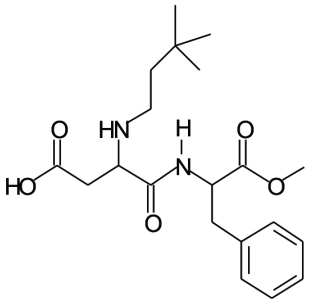
g) Cortisona



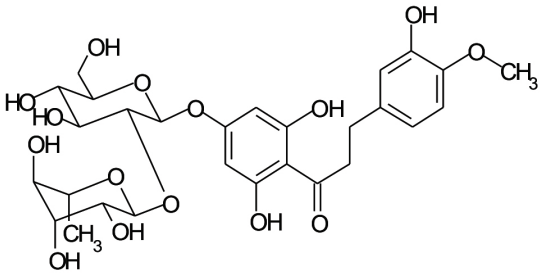
h) Tromboxano A_2



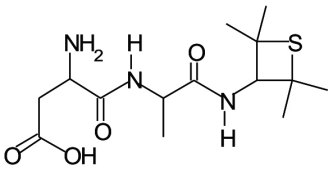
Edulcorantes



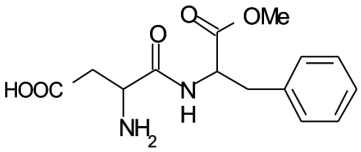
neotame



neohesperidina

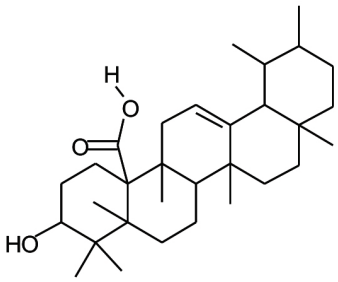


alitamo

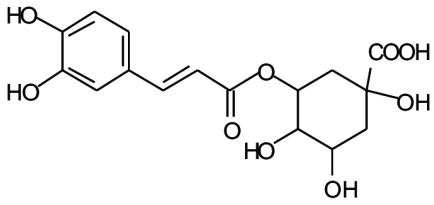


acesulfamo K

Ácidos en vegetales

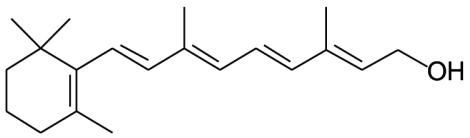


ácido ursólico cera epidérmica

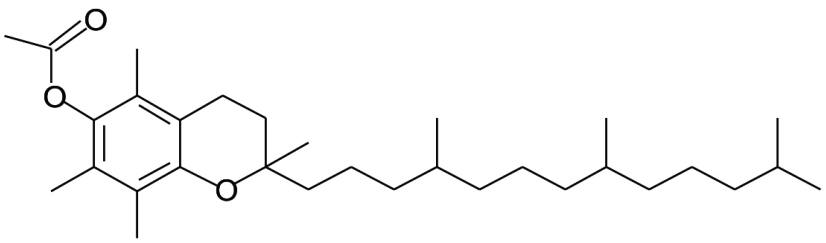


clorogénico

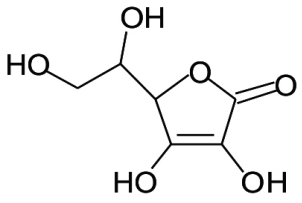
Vitaminas



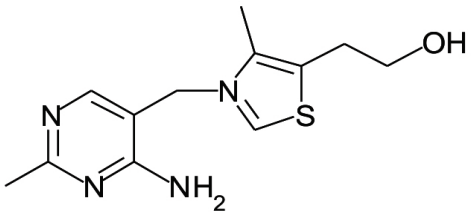
Retinol (Vitamina A)



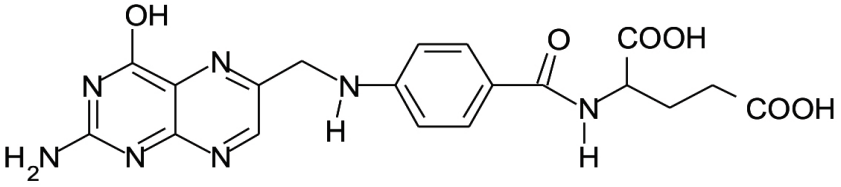
Acetato de α-tocoferilo (vitamina E)



Ácido ascórbico (vitamina C)



tiamina (B_1)



ácido fólico

2. Alcanos

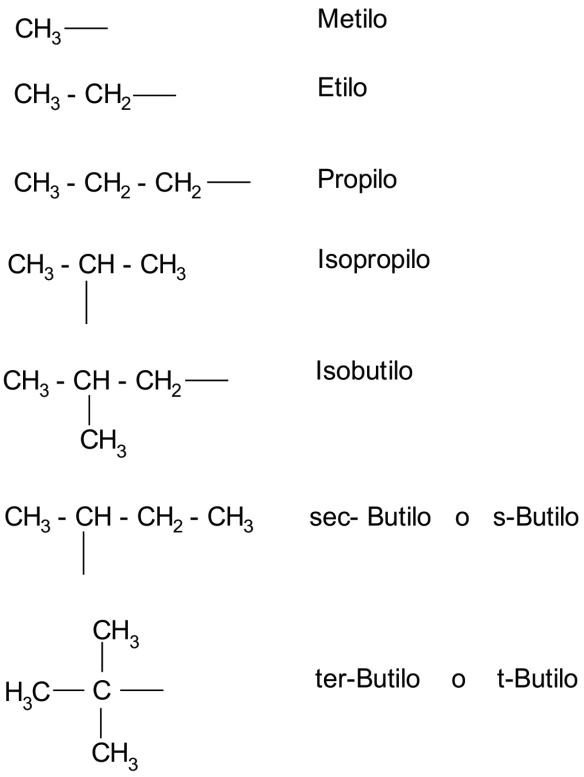
2.1 Nomenclatura

Excepto para los cuatro primeros miembros de la familia, el nombre se deriva del prefijo griego (o latino) que indica el número particular de carbonos en el alcano, seguido de la terminación "ano":

CH_4	Metano
$CH_3 - CH_3$	Etano
$CH_3 - CH_2 - CH_3$	Propano
$CH_3 - CH_2 - CH_2 - CH_3$	Butano
$CH_3 - (CH_2)_3 - CH_3$	Pentano
$CH_3 - (CH_2)_4 - CH_3$	Hexano
$CH_3 - (CH_2)_5 - CH_3$	Heptano
$CH_3 - (CH_2)_6 - CH_3$	Octano
$CH_3 - (CH_2)_7 - CH_3$	Nonano
$CH_3 - (CH_2)_8 - CH_3$	Decano
$CH_3 - (CH_2)_9 - CH_3$	Undecano
$CH_3 - (CH_2)_{10} - CH_3$	Dodecano
$CH_3 - (CH_2)_{11} - CH_3$	Tridecano
$CH_3 - (CH_2)_{16} - CH_3$	Octadecano
$CH_3 - (CH_2)_{18} - CH_3$	Icosano

2.2 Grupos alquilos

Estos grupos se nombran cambiando la terminación ano del alcano correspondiente por "ilo".



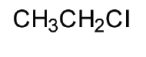
2.3 Nombres sistemáticos de alcanos ramificados

Para diseñar un sistema de nomenclatura aplicable a los compuestos complejos, se han reunido periódicamente, desde 1892, varios comités y comisiones en representación de los químicos del mundo. En su forma actual, el sistema diseñado se conoce como sistema IUPAC (*International Union of Pure and Applied Chemistry*)

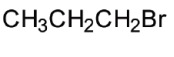
En esencia, las reglas del sistema IUPAC son:

1. Seleccione la cadena continua más larga y considere, luego, el compuesto que se deriva de aquella. Identifique las ramificaciones o grupos alquilo.
2. Numere la cadena carbonada de referencia; comience por el extremo que resulte del empleo de los números más bajos posibles.
3. Si un mismo grupo alquilo aparece más de una vez, como cadena lateral, indíquelo por los prefijos di-, tri-, tetra-, etc., para destacar cuántos de esos *alquilos* hay, e indique con números la posición de cada grupo.
4. Si a la cadena principal se unen varios grupos *alquilo* diferentes, nómbrelos en orden alfabético.

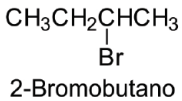
5. Los halogenuros de *alquilo*, que aparecen muchas veces en la química de los alcanos, se denominan *haloalcanos*; es decir, el halógeno se trata el halógeno como si fuese una cadena lateral. Primero se nombra el alcano como si no contuviese halógeno, y a continuación se incluye el fluoro, cloro, bromo o yodo, junto con los números y prefijos que fuesen necesarios.



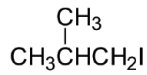
1-Cloroetano



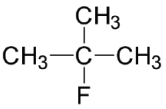
1-Bromopropano



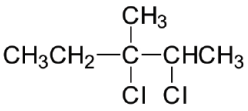
2-Bromobutano



2-Metil-1-yodopropano



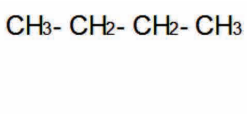
2-Fluoro-2-metilpropano



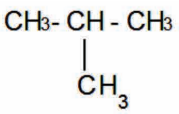
2,3-Dicloro-3-metilpentano

2.4 Isómeros

Isómeros son compuestos de igual fórmula molecular, pero de diferente fórmula estructural. Los alcanos presentan isomería de cadena o esqueletal.



butano



isobutano

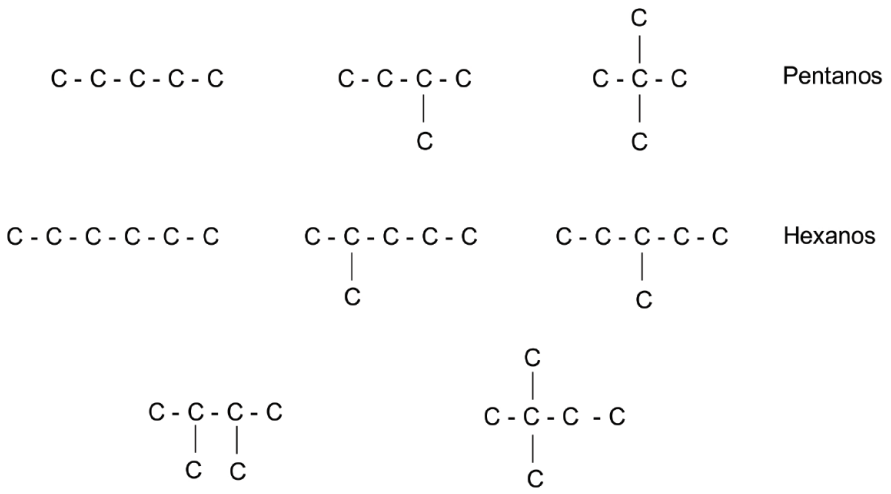
Constantes físicas de los isómeros del butano

Tabla 3.1 Constantes físicas de los butanos isómeros

	n-Butano	Isobutano
Punto de ebullición (ºC)	0	-12
Punto de fusion (ºC)	-138	-159
Densidad relativa, a -20ºC	0.622	0.604
Solubilidad en 100 mL alcohol	1813 mL	1320 mL

Hay tres pentanos isómeros, cinco hexanos, nueve heptanos y setenticinco decanos (C_{10}); para el icosano (20 carbonos) hay trescientos sesentiseis mil trescientos diecinueve estructuras isómeras posibles.

Los esqueletos carbonados de los pentanos y hexanos isómeros se indican a continuación:

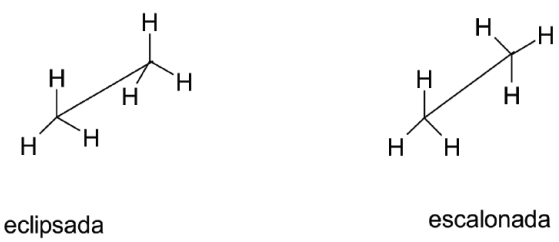


2.5 Conformaciones

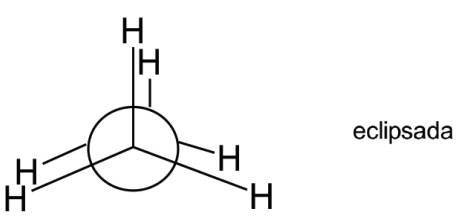
Son ordenamientos atómicos diferentes que pueden intercambiarse por rotación en torno a enlaces simples.

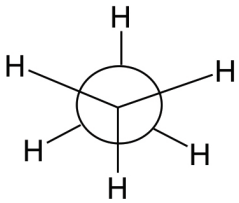
El etano presenta dos conformaciones: *eclipsada* y *escalonada*. La infinidad de conformaciones intermediarias se llaman sesgadas.

Para representar las conformaciones, con frecuencia, se utilizan dos tipos de fórmulas tridimensionales: 1) fórmulas de caballete, y 2) proyección de Newman (propuesta por M. S. Newman de la Universidad del Estado de Ohio).



Fórmulas de caballete para el etano

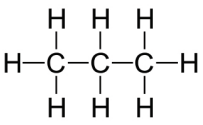


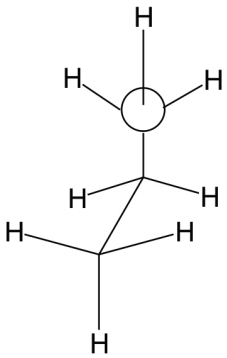


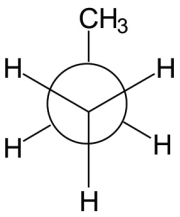
escalonada

Proyecciones de Newman para el etano

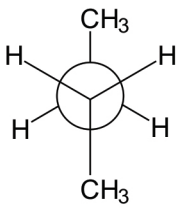
La energía requerida para rotar la molécula de etano en torno al enlace carbono-carbono se llama *energía torsional.*



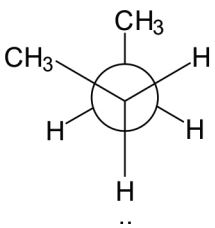




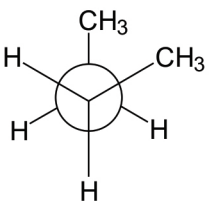
Propano



Conformación anti



Butano

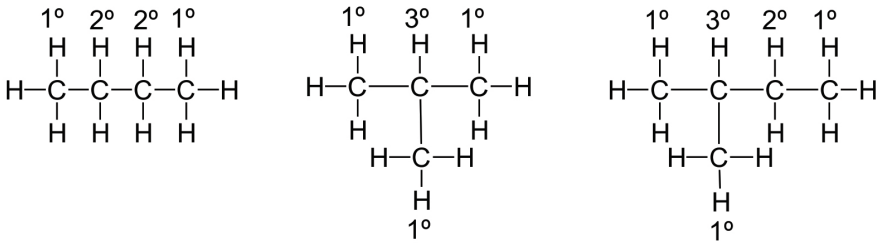


Conformaciones oblícuas

Se ha determinado que la conformación *anti* es más estable (en 0.8 kcal/mol) que la *oblicua.*

2.6 Tipos de átomos de carbono e hidrógeno

Un átomo de carbono **primario** (1º) está unido a un solo carbono adicional; uno **secundario** (2º), a otros dos; y uno **terciario** (3º), a tres. Por ejemplo:

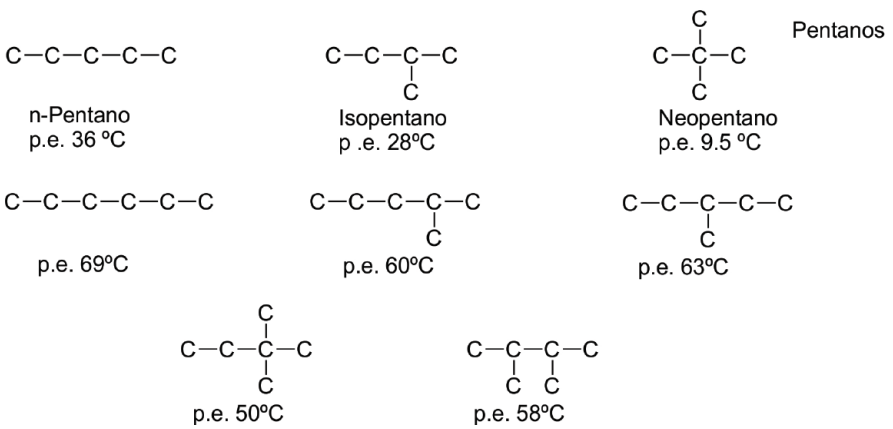


2.7 Propiedades físicas

Un alcano sólo presenta enlaces covalentes, que enlazan dos átomos iguales, por lo que no son polares. Las fuerzas que mantienen unidas las moléculas no polares (fuerzas de Van der Waals) son débiles y de alcance muy limitado. Salvo para los alcanos muy pequeños, *el punto de ebullición aumenta de 20 a 30 grados por cada carbono que se agrega a la cadena.*

Los cuatro primeros n-alcanos son gases; como resultado del aumento del punto de ebullición y punto de fusión con la longitud creciente de la cadena, los trece siguientes (C_5-C_{17}) son líquidos, y los de 18 átomos de carbono o más, sólidos.

Un isómero ramificado tiene un punto de ebullición más bajo que uno de cadena recta y, además, cuanto más numerosas son las ramificaciones, menor es el punto de ebullición correspondiente.



Alcanos de cadena lineal

Nombre	Fórmula	P.f., ° C	P.e., ° C	Densidad relativa (a 20 °C)
Metano	CH_4	-183	-162	
Etano	CH_3CH_3	-172	- 88.5	
Propano	$CH_3CH_2CH_3$	-187	- 42	
Butano	$CH_3(CH_2)_2CH_3$	-138	0	
Pentano	$CH_3(CH_2)_3CH_3$	-130	36	0.626
Hexano	$CH_3(CH_2)_4CH_3$	- 95	69	.659
Heptano	$CH_3(CH_2)_5CH_3$	- 90.5	98	.684
Octano	$CH_3(CH_2)_6CH_3$	- 57	126	.703
Nonano	$CH_3(CH_2)_7CH_3$	- 54	151	.718
Decano	$CH_3(CH_2)_8CH_3$	- 30	174	.730
Undecano	$CH_3(CH_2)_9CH_3$	- 26	196	.740
Dodecano	$CH_3(CH_2)_{10}CH_3$	- 10	216	.749
Tridecano	$CH_3(CH_2)_{11}CH_3$	- 6	234	.757
Tetradecano	$CH_3(CH_2)_{12}CH_3$	5.5	252	.764
Pentadecano	$CH_3(CH_2)_{13}CH_3$	10	266	.769
Hexadecano	$CH_3(CH_2)_{14}CH_3$	18	280	.775
Heptadecano	$CH_3(CH_2)_{15}CH_3$	22	292	
Octadecano	$CH_3(CH_2)_{16}CH_3$	28	308	
Nonadecano	$CH_3(CH_2)_{17}CH_3$	32	320	
Icosano	$CH_3(CH_2)_{18}CH_3$	36		
Isobutano	$(CH_3)_2CHCH_3$	-159	- 12	
Isopentano	$(CH_3)_2CHCH_2CH_3$	-160	28	.620
Neopentano	$(CH_3)_4C$	- 17	9.5	
Isohexano	$(CH_3)_2CH(CH_2)_2CH_3$	-154	60	.654
3-Metilpentano	$CH_3CH_2CH(CH_3)CH_2CH_3$	-118	63	.676
2,2-Dimetilbutano	$(CH_3)_3CCH_2CH_3$	- 98	50	.649
2,3-Diemtilbutano	$(CH_3)_2CHCH(CH_3)_2$	-129	58	.668

P.e.: punto de ebullición
P.f.: punto de fusión

De acuerdo con la regla empírica <<una sustancia disuelve a otra similar>>, los alcanos son solubles en disolventes no polares como benceno, éter y cloroformo, e insolubles en agua y otros disolventes fuertemente polares.

La densidad de los alcanos aumenta en función del tamaño, tiende a nivelarse en torno a 0.8, de modo que todos ellos son menos densos que el agua. No es de sorprender que casi todos los compuestos orgánicos sean menos densos que el agua, puesto que, al igual que los alcanos, están constituidos principalmente por carbono e hidrógeno.

En general, para que una sustancia sea más densa que el agua, debe contener por lo menos, un átomo pesado, como el bromo o el yodo, o varios átomos, como el cloro.

2.8 Fuente industrial

La fuente principal de alcanos es el petróleo y el gas natural. Una segunda fuente potencial de alcanos es el carbón. Se están desarrollando procesos que lo convierten, por medio de la hidrogenación, en gasolina y petróleo combustible, como también en gas sintético, para contrarrestar la escasez previsible del gas natural.

Constituyentes del petróleo

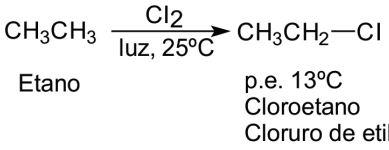
Fracción	Temperatura de destilación, °C	Número de carbonos
Gas	Bajo 20°C	C_1-C_4
Eter de petróleo	20-60 °C	C_5-C_6
Ligroína (nafta ligera)	60-100 °C	C_6-C_7
Gasolina natural	40-205 °C	C_5-C_{10}, y cicloalcanos
Querosene	175-325 °C	C_{12}-C_{18}, y aromáticos
Gasóleo	Sobre 275 °C	C_{12} y superiores
Aceite lubricante	Líquidos no volátiles	Probablemente cadenas largas unidas a estructuras cíclicas
Asfalto o coque	Sólidos no volátiles	Estructuras policíclicas

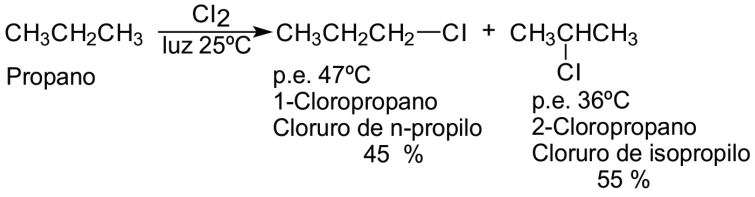
2.9 Reacciones

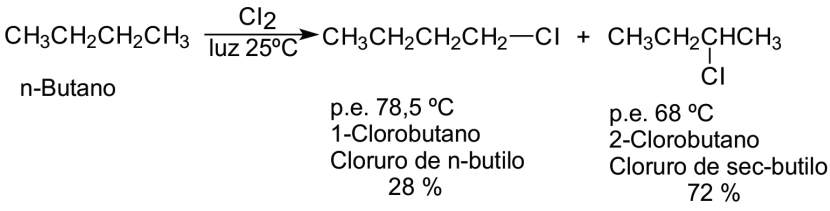
a. Halogenación

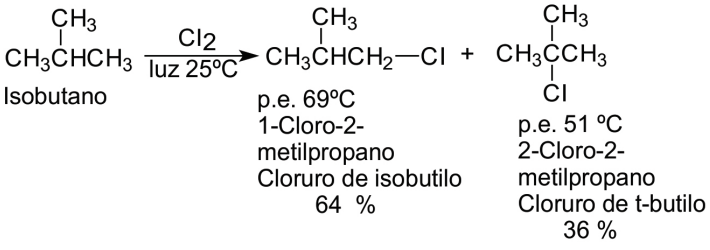
Bajo la influencia de la luz ultravioleta, o a 250-400 °C, el cloro o el bromo convierte los alcanos en cloroalcanos (cloruros de alquilo) o bromoalcanos (bromuros de alquilo), formándose simultáneamente una cantidad equivalente de cloruro o bromuro de hidrógeno.

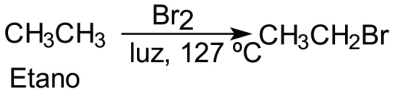
Tanto la cloración como la bromación dan mezclas de isómeros, pero las *cantidades relativas* de los distintos isómeros difieren mucho, dependiendo del halógeno usado. La cloración genera mezclas en las que ningún isómero predomina notoriamente, existe reactividad; en cambio, en la bromación puede prevalecer un isómero hasta el punto de constituir el único producto, con un 97-99% del total de la mezcla. La bromación presenta alto grado de selectividad en cuanto a los átomos de hidrógeno que se reemplazan.

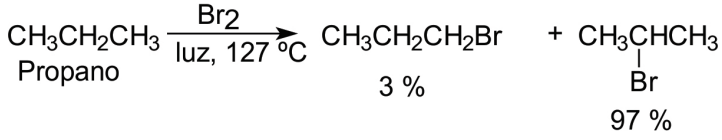

CH3CH3
Cl2
luz, 25ºC
CH3CH2—Cl
Etano
p.e. 13ºC
Cloroetano
Cloruro de etilo

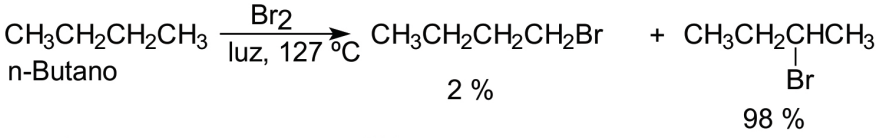

CH3CH2CH3
Cl2
luz 25ºC
CH3CH2CH2—Cl + CH3CHCH3
Cl
Propano
p.e. 47ºC
1-Cloropropano
Cloruro de n-propilo
45 %
p.e. 36ºC
2-Cloropropano
Cloruro de isopropilo
55 %

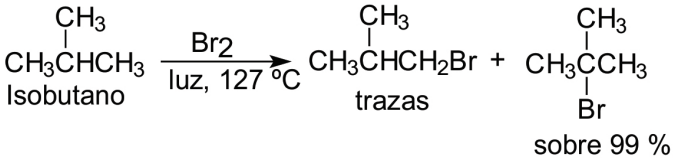

CH3CH2CH2CH3
Cl2
luz 25ºC
CH3CH2CH2CH2—Cl + CH3CH2CHCH3
Cl
n-Butano
p.e. 78,5 ºC
1-Clorobutano
Cloruro de n-butilo
28 %
p.e. 68 ºC
2-Clorobutano
Cloruro de sec-butilo
72 %


CH3
CH3CHCH3
Cl2
luz 25ºC
CH3CHCH2—Cl + CH3CCH3
Cl
Isobutano
p.e. 69ºC
1-Cloro-2-
metilpropano
Cloruro de isobutilo
64 %
p.e. 51 ºC
2-Cloro-2-
metilpropano
Cloruro de t-butilo
36 %


CH3CH3
Br2
luz, 127 ºC
CH3CH2Br
Etano

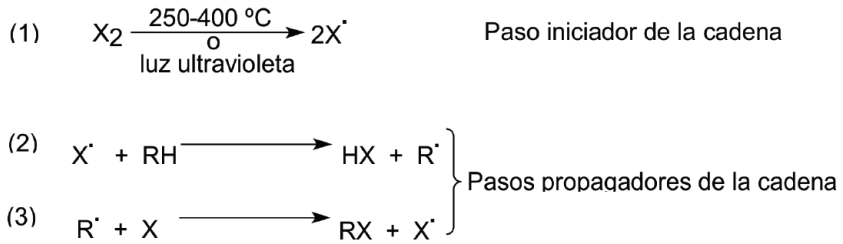

CH3CH2CH3
Br2
luz, 127 ºC
CH3CH2CH2Br + CH3CHCH3
Br
Propano
3 %
97 %


CH3CH2CH2CH3
Br2
luz, 127 ºC
CH3CH2CH2CH2Br + CH3CH2CHCH3
Br
n-Butano
2 %
98 %

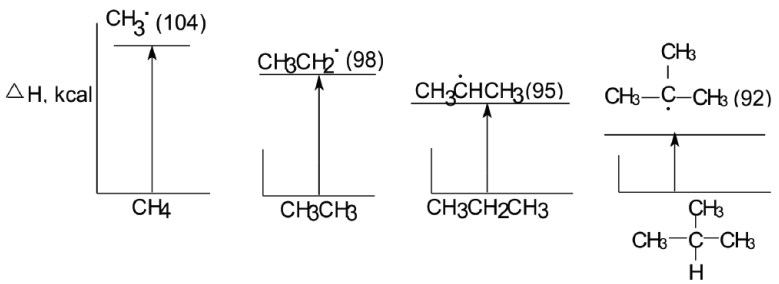

CH3
CH3CHCH3
Br2
luz, 127 ºC
CH3CHCH2Br + CH3CCH3
Br
Isobutano
trazas
sobre 99 %

b. Mecanismo de la halogenación

La halogenación de los alcanos presenta el siguiente mecanismo:



Producto intermedio. El mecanismo de reacción de los alcanos y cicloalcanos considera la formación de especies intermedias llamadas radicales libres, los cuales son especies muy reactivas, neutras. La estabilidad de estas especies se incrementa con las ramificaciones y contiene menor energía. En el siguiente gráfico, el t-butilo es más estable por contener menor energía.



Estabilidades relativas de radicales libres
(Gráficos alineados entre sí para simplificar la comparación)

c. Combustión

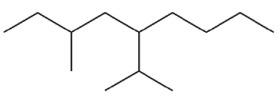
Es el proceso mediante el cual los alcanos y cicloalcanos reacionan con el oxígeno, generando energía, luz y otros productos. La ecuación general de una combustión completa es:

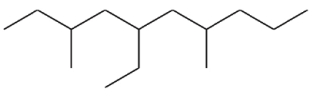
Práctica de aula - alcanos y cicloalcanos

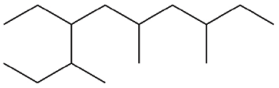
1. Escribir el nombre sistemático de los siguientes alcanos y cicloalcanos:

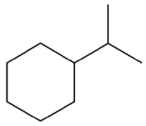
a) $(CH_3)_2CHCH_2CH(CH_3)CH_2CH_3$

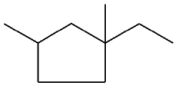
b) $CH_3 - C(CH_3)_2 - CH(CH_2CH_3)_2$

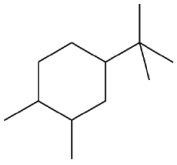
c) 

d) 

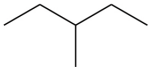
e) 

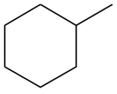
f) 

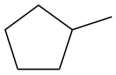
g) 

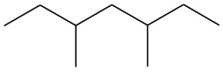
h) 

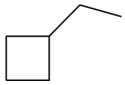
2. Formular los isómeros de cadena del hexano.
3. Formular los isómeros de posición y geométricos del 1,2-dimetilciclohexano.
4. Formular los isómeros conformacionales del pentano (referencia C2 y C3) y del 1,2-dimetilciclohexano.
5. Completar las siguientes reacciones químicas:

a)  + Cl_2 —luz→

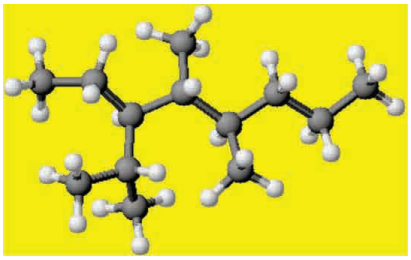
b)  + Cl_2 —luz→

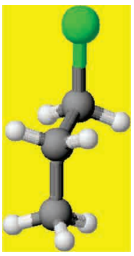
c)  + Br_2 —calor→

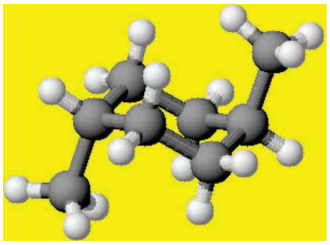
d)  + O_2 —chispa→

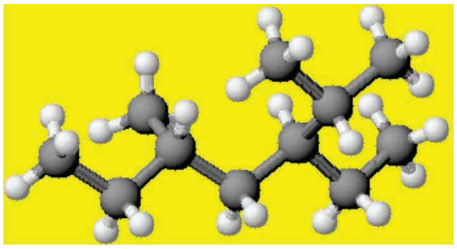
e)  + O_2 —chispa→

6. Formular el compuesto correspondiente en cada caso:

a) 

b) 

c) 

d) 

7. Escriba cinco sustancias de uso común en la vida diaria, que contengan alcanos y cicloalcanos.
8. Escriba tres solventes en los cuales es el hexano soluble.
9. Completar las siguientes reacciones:

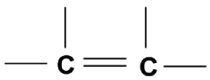
a) 2,2,4-trimetilpentano + O_2 /calor ⟶

b) t-butilciclohexano + Br_2 /calor ⟶

c) ciclohexano + Cl_2 /luz ⟶

3. Alquenos y alquinos

3.1 Grupo funcional



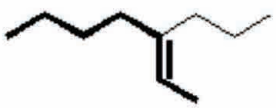
alquenos

alquinos

3.2 Nomenclatura de alquenos

a) Identificar la cadena principal

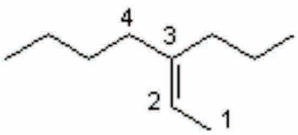
La cadena principal es la cadena más larga que contenga al doble enlace. La terminación "ano" del alcano correspondiente se cambia por "eno" para indicar la presencia del doble enlace.

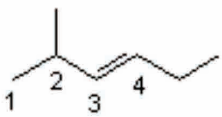


Nombrado como un hepteno y no como un octeno, ya que el doble enlace no está contenido completamente en la cadena de ocho carbonos.

b) Numerar los átomos de la cadena

Empezar por el extremo más cercano al doble enlace, asignar números a los carbonos de la cadena. Si el doble enlace es equidistante de los dos extremos, comience por el extremo más cercano al primer punto de ramificación. Esta regla asegura que los carbonos del doble enlace reciban los números más bajos posibles.

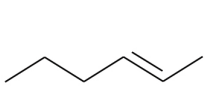




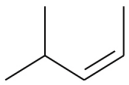
c) Escribir el nombre completo

Ordenar los sustituyentes en orden alfabético e insertar índices numéricos y prefijos como se ha hecho anteriormente. Para indicar la posición del doble enlace en la cadena, se escribe un índice justo antes del nombre de la cadena matriz; por ejemplo 2-penteno. Este índice debe ser el menor de los dos correspondientes a los carbonos del doble enlace.

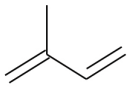
Si está presente más de un doble enlace, indique la posición de cada uno y use los sufijos dieno, trieno, tetraeno, etc. Cuando exista la posibilidad de isomería geométrica, indique el isómero del que se trata utilizando los prefijos *cis-, trans-, (E)- o (Z)-*.



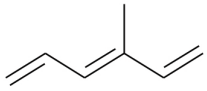
2-hexeno



4-metil-2-penteno

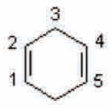


2-metil-1,3-butadieno

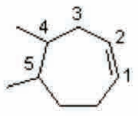


3-metil-1,3,5-hexatrieno

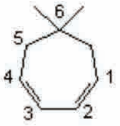
Los cicloalquenos se nombran de forma tal que el doble enlace reciba los índices 1 y 2 y que el primer punto de ramificación reciba el valor más bajo posible. Cuando hay sólo un doble enlace, no es necesario especificar su posición, pues se considera que está en el carbono 1.



1,4-ciclohexadieno



4,5-dimetilciclohepteno

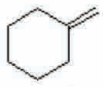


6,6-dimetil-1,3-cicloheptadieno

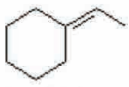
Existen algunos sustituyentes insaturados cuyos nombres comunes son reconocidos por la IUPAC:

	$H_2C=$	$H_2C=CH-$	$CH_3CH=$	$H_2C=CH-CH_2-$
Común		Vinil		Alil
Sistemático	metilen	Etenil	etiliden	2-Propenil

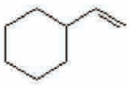
Su uso se ilustra a continuación:



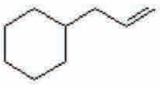
metilenciclohexano



etilidenciclohexano



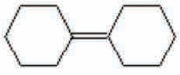
vinilciclohexano
o etenilciclohexano



alilciclohexano
o (2-propenil)ciclohexano

cloruro de vinilo

bromuro de alilo

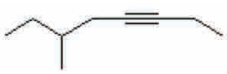


ciclohexilidenciclohexano

3.3 Nomenclatura de alquinos

Los alquinos siguen las mismas reglas generales de nomenclatura de hidrocarburos ya discutidas. Para un alquino, el sufijo "ano" es sustituido por "ino" en el nombre del compuesto. La posición del triple enlace se indica con su número en la cadena. La numeración empieza por el extremo de la cadena más cercano al triple enlace.

Los compuestos que contienen enlaces dobles y triples se llaman alqueninos (y no alquinenos). En este caso, la cadena se empieza a numerar desde el extremo más cercano al primer enlace múltiple ya sea este doble o triple. Sin embargo, cuando son posibles dos formas alternas de numeración, se escoge el extremo que permita asignar a los enlaces dobles, los números más bajos que a los triples. Por ejemplo, 1-hepten-6-ino.



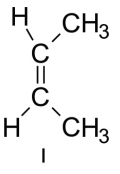
6-metil-3-octino

1-hepten-6-ino

trans-4-metil-7-nonen-1-ino

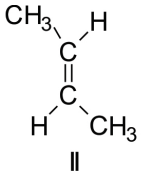
3.4 Isomería geométrica de alquenos

Se presenta cuando existe impedimento de rotación respecto a un doble enlace o estructura cíclica. El 2-buteno puede formularse de dos formas, las que difieren solo en la orientación espacial de sus átomos (pero son semejantes en cuanto a qué átomos se unen a cuáles otros). Los 2-butenos isómeros son las estructuras I y II, cuyos nombres se diferencian por los prefijos *cis*- (del latín, <<a este lado>>) y *trans*- (del latín, <<al otro lado>>), que indican que los grupos metilo se encuentran al mismo lado o en lados opuestos de la molécula.



I

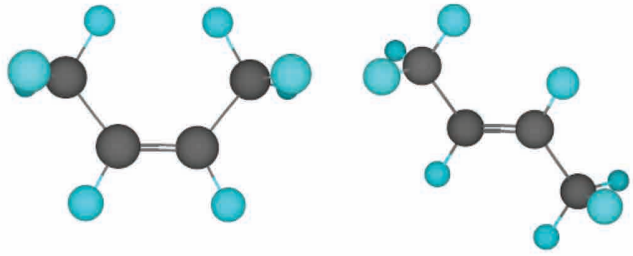
cis-2-Buteno
p.e. + 4 ºC

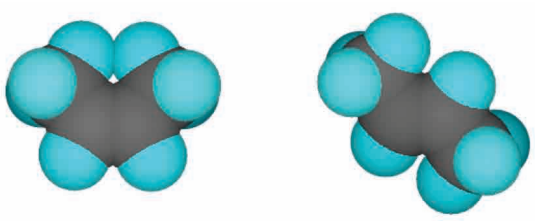


II

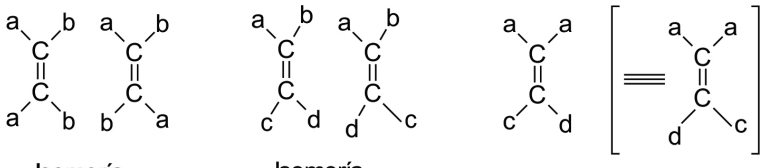
trans-2-Buteno
p.e. + 1 ºC

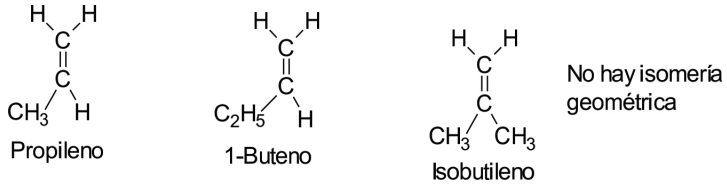
Isómeros geométricos



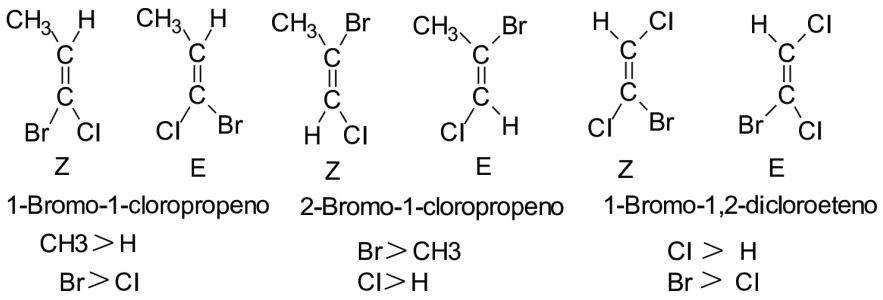


El fenómeno de la isomería geométrica es general y puede encontrarse en cualquier clase de compuestos con dobles enlaces carbono-carbono (e incluso con dobles enlaces de otros tipos). Sin embargo, la isomería geométrica no puede existir si cualquiera de los carbonos lleva dos grupos idénticos.





Los prefijos *cis* y *trans* son adecuados para etilenos disustituidos y algunos trisustituidos; pero, ¿cómo se especifica las configuraciones de las moléculas que se muestran a continuación? ¿Qué grupos son los puntos de referencia?. Observando cada uno de los carbonos del doble enlace, se ordenan sus dos átomos o grupos de acuerdo con la secuencia de Cahn-Ingold Prelog. A continuación, se elige el grupo de mayor prioridad en cada uno de los carbonos y se determina si ambos se encuentran al mismo lado de la molécula o si están en lados opuestos. Se usa la letra Z para indicar *al mismo lado* y la letra E para indicar *lados opuestos*. (Del alemán, *zusammen*, junto, y *entgegen*, opuesto.)



3.5 Propiedades físicas

Los alquenos y alquinos poseen propiedades físicas similares a las de los alcanos. Son insolubles en agua, pero bastante solubles en líquidos no polares, como benceno, éter, clororformo o ligroína, son menos densos que el agua y, a lo sumo, sólo débilmente polares.

ALQUENOS

Nombre	Fórmula	p.f., ºC	p.e., ºC	Densidad relativa (a 20 ºC)
Etileno	$CH_2=CH_2$	-169	-102	
Propileno	$CH_2=CHCH_3$	-185	- 48	
1-Buteno	$CH_2=CHCH_2CH_3$		- 6.5	
1-Penteno	$CH_2=CH(CH_2)_2CH_3$		30	0.643
1-Hexeno	$CH_2=CH(CH_2)_3CH_3$	-138	63.5	.675
1-Hepteno	$CH_2=CH(CH_2)_4CH_3$	-119	93	.698
1-Octeno	$CH_2=CH(CH_2)_5CH_3$	-104	122.5	.716
1-Noneno	$CH_2=CH(CH_2)_6CH_3$		146	.731
1-Deceno	$CH_2=CH(CH_2)_7CH_3$	-87	171	.743

ALQUINOS

Nombre	Fórmula	p.f., ºC	p.e., ºC	Densidad relativa (a 20 ºC)
Acetileno	$HC\equiv CH$	- 82	-75	
Propino	$HC\equiv CCH_3$	-101.5	-23	
1-Butino	$HC\equiv CCH_2CH_3$	-122	9	
1-Pentino	$HC\equiv C(CH_2)_2CH_3$	-98	40	0.695
1-Hexino	$HC\equiv C(CH_2)_3CH_3$	-124	72	0.719
1-Heptino	$HC\equiv C(CH_2)_4CH_3$	-80	100	0.733
1-Octino	$HC\equiv C(CH_2)_5CH_3$	-70	126	0.747
1-Nonino	$HC\equiv C(CH_2)_6CH_3$	-65	151	0.763
1-Decino	$HC\equiv C(CH_2)_7CH_3$	-36	182	0.770
2-Butino	$CH_3C\equiv CCH_3$	-24	27	0.694
2-Pentino	$CH_3C\equiv CCH_2CH_3$	-101	55	0.714
3-Metil-1-butino	$HC\equiv CCH(CH_3)_2$		29	0.665
2-Hexino	$CH_3C\equiv C(CH_2)_2CH_3$	-92	84	0.730
3-Hexino	$CH_3CH_2C\equiv CCH_2CH_3$	-51	81	0.725
3,3-Dimetil-1-butino	$HC\equiv CC(CH_3)_3$	-81	38	0.669
4-Octino	$CH_3(CH_2)_2C\equiv C(CH_2)_2CH_3$		131	0.748
5-Decino	$CH_3(CH_2)_3C\equiv C(CH_2)_3CH_3$		175	0.769

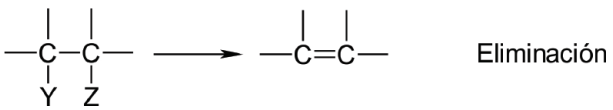
3.6 Fuente industrial

El *cracking*, en sus diversas formas, de los alcanos forma *alquenos* menores, como etileno, propileno y butilenos.

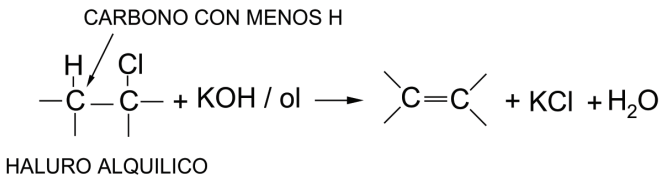
El etino o acetileno es el alquino industrial más importante y más simple de la familia. Tradicionalmente, se prepara por la reacción del agua con el carburo de calcio, CaC_2, que se obtiene, a su vez, por reacción entre el óxido de calcio y el coque, a altas temperaturas de un horno eléctrico.

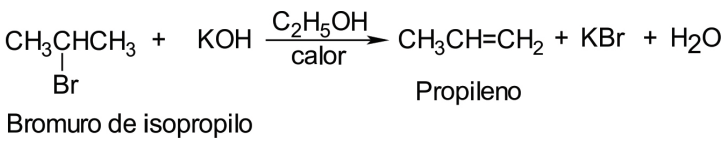
3.7 Preparación de alquenos

La formación de un doble enlace carbono-carbono en una molécula que sólo tiene enlaces simples supone necesariamente la eliminación de átomos de dos carbonos adyacentes:

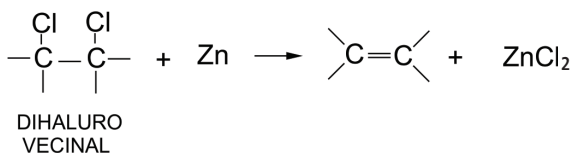


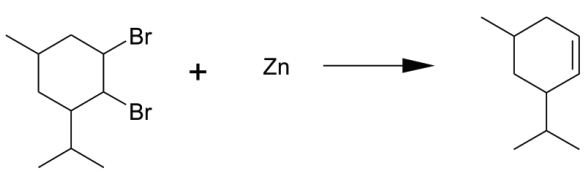
a. Deshidrohalogenación de un haluro alquílico



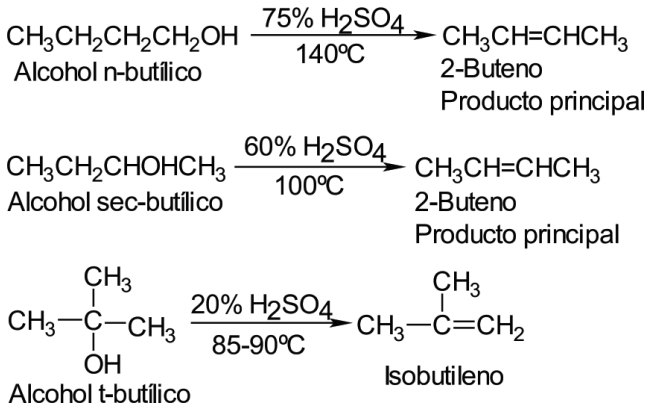


b. Deshalogenación de un dihaluro vecinal





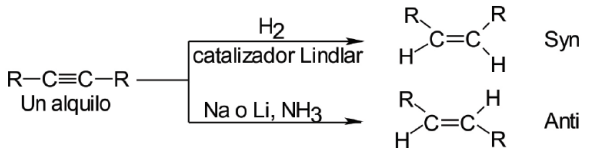
c. Deshidratación de un alcohol

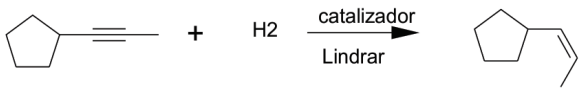


La regla de Saytzeff se refiere la tendencia a formar el alqueno más sustituido.
Facilidad de formación de alquenos:

$$R_2C{=}CR_2 > R_2C{=}CHR > R_2C{=}CH_2,\ RCH{=}CHR > RCH{=}CH_2$$

d. Reducción de alquinos

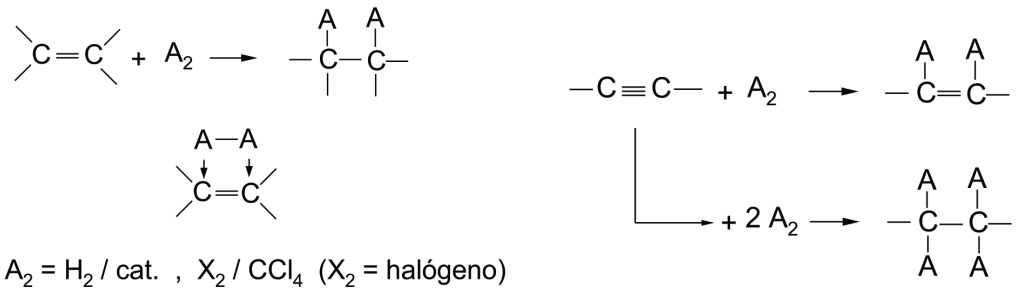




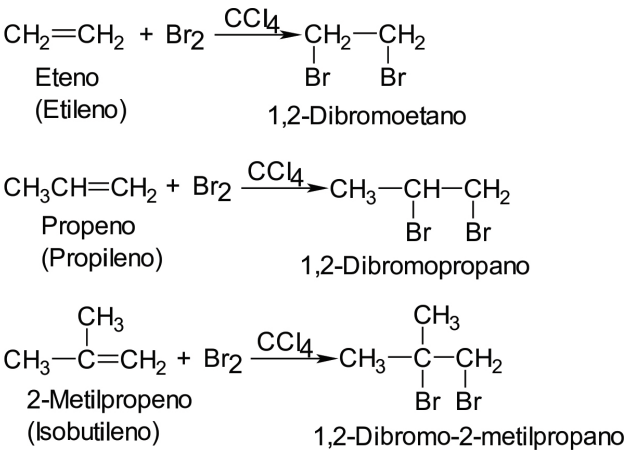
3.8 Reacciones de alquenos y alquinos

Los alquenos y alquinos presentan reacciones de adición electrofílica (reactivos simétricos o asimétricos).

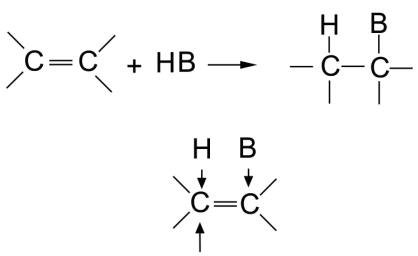
a. Adición de reactivos simétricos



$A_2 = H_2$ / cat. , X_2 / CCl_4 (X_2 = halógeno)

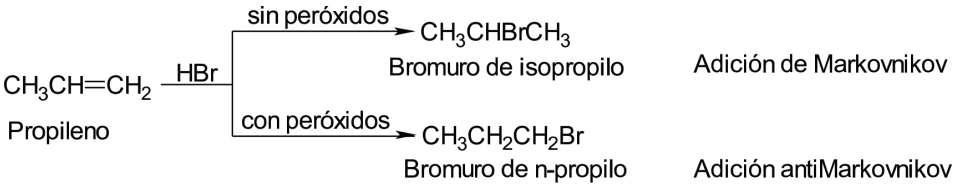


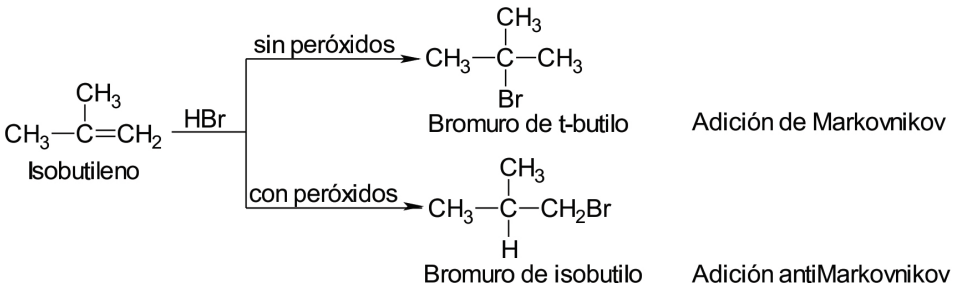
b. Adición de reactivos asimétricos

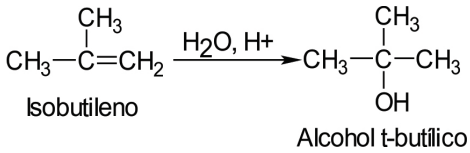


REGLA DE MARKOVNIKOV

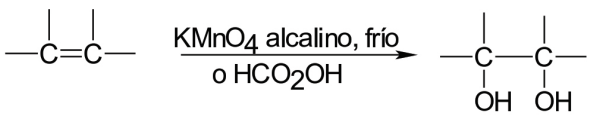
HB = HCl, HBr, H_2O / H^+

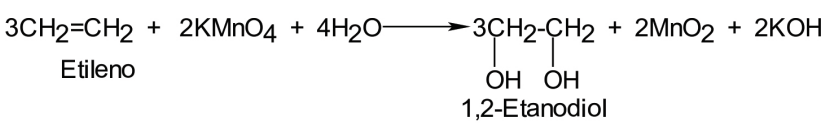


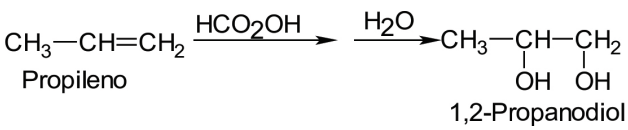




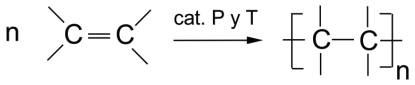
c. Hidroxilación



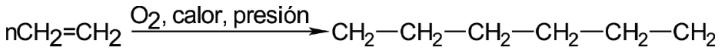




d. Polimerización

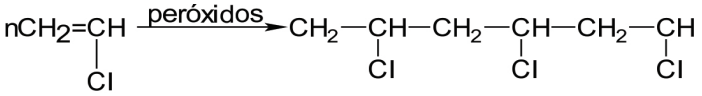


MONÓMERO POLÍMERO (PLASTICOS)

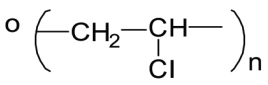


o (-CH_2CH_2-)n

Polietileno



Cloruro de vinilo



Poli(cloruro de vinilo)

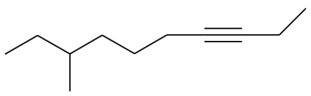
Práctica de aula - alquenos y alquinos

1. Dibujar y nombrar a todos los alquenos isómeros de fórmula molecular C7H14 que tienen un doble enlace trisustituido.
2. Nombrar sistemáticamente a los siguientes compuestos:

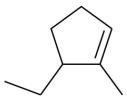
a) CH_3-CH(CH_2CH_3)-CH=$CHCH_3$

b) $(CH_3)_2CHCH_2CH_2CH$=CHCH=CH_2

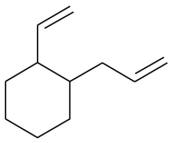
c)



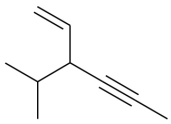
d)



e)



f)



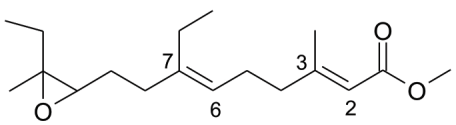
3. Escribir las fórmulas estructurales de los siguientes compuestos:
   a. *cis*-3-Octeno
   b. *(E)*-3-Cloro-2-hexeno
   c. 1,1,-Dialilciclobutano
   d. Etinilciclohexano
   e. 2,5-dimetil-3-hexino
   f. Ciclotridecino

4. La feromona sexual de las abejas es el estereoisómero *E* del compuesto:

$CH_3COC(CH_2)_4CH_2CH$=CHCOOH

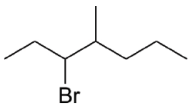
Escribir una fórmula estructural para este compuesto.

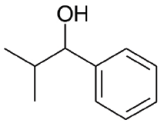
5. Una hormona del crecimiento de la mariposa de la seda tiene la estructura:

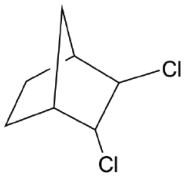


Identificar la estereoquímica de los enlaces dobles de acuerdo con el sistema *E y Z*.

6. F v Completar las siguientes reacciones químicas:

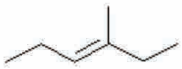
a)  + KOH / CH_3OH ⟶

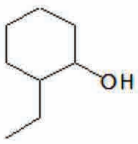
b)  + H_3PO_4 $\xrightarrow{\text{calor}}$

c)  + Zn ⟶

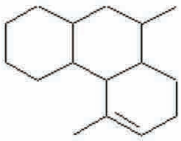
d) CaC_2 + H_2O ⟶

7. Completar las siguientes reacciones químicas:

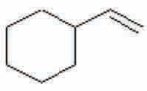
a)  + HBr ⟶

b)  + H^+ $\xrightarrow{\text{calor}}$

c) + $KMnO_4 / OH^-$ ⟶

d)  + HBr $\xrightarrow{\text{peróxidos}}$

e) + HCl ⟶

f)  + catalizador $\xrightarrow{\text{P, T}}$

4. Compuestos aromáticos

4.1 Introducción

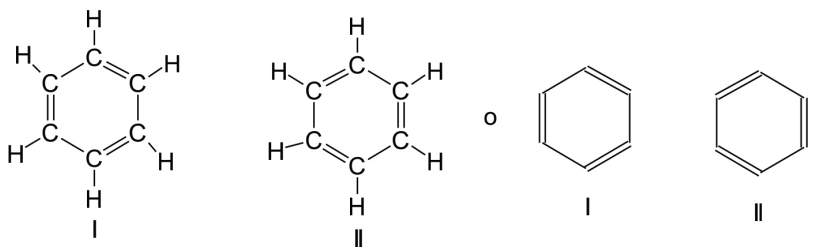
Los químicos han considerado útil dividir los hidrocarburos en dos grandes clases: alifáticos y aromáticos. Los significados originales de las palabras alifático (graso) y aromático (fragante) han dejado de tener sentido.

Los hidrocarburos aromáticos son el benceno y los compuestos de comportamiento químico similar. Las propiedades aromáticas son las que distinguen al benceno de los hidrocarburos alifáticos (alcanos, alquenos, alquinos y alicíclicos). La molécula del benceno es un anillo con estructura especial. Hay ciertos compuestos, también anulares, que parecen diferir estructuralmente del benceno y, sin embargo, se comportan de forma similar. Estos compuestos se parecen estructuralmente al benceno en su estructura electrónica básica, por lo que también son aromáticos.

4.2 Benceno

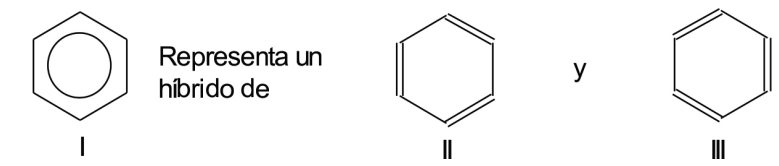
El benceno se conoce desde 1825; tiene la fórmula molecular C6H6 y sus propiedades químicas y físicas son mejor conocidas que cualquier otro compuesto orgánico. A pesar de ello, hasta el año 1931 no se había logrado proponer una estructura satisfactoria para esta sustancia, y tuvo que pasar de 10 a 15 años para que fuera de uso general entre los químicos orgánicos.

Estructura de Kekulé:



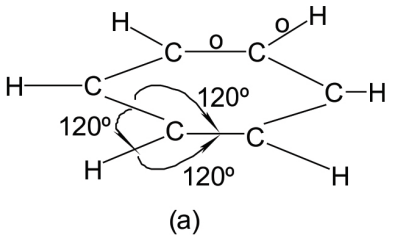
Existen evidencias experimentales que demuestran que el benceno no se comporta como un alqueno (ciclohexatrieno):

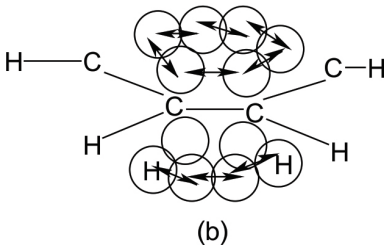
(a) Experimenta reacciones de sustitución, más que de adición.
(b) Los calores de hidrogenación y combustión son menores de lo esperado (basado en el ciclohexatrieno), lo cual demuestra su estabilidad (menor energía).
(c) Todos los enlaces carbono-carbono del benceno son iguales y de una longitud intermedia entre enlaces simples y dobles. Esto se explica si se consideran las estructuras resonantes, o si de acuerdo a la teoría orbital existe enlace pí deslocalizado.

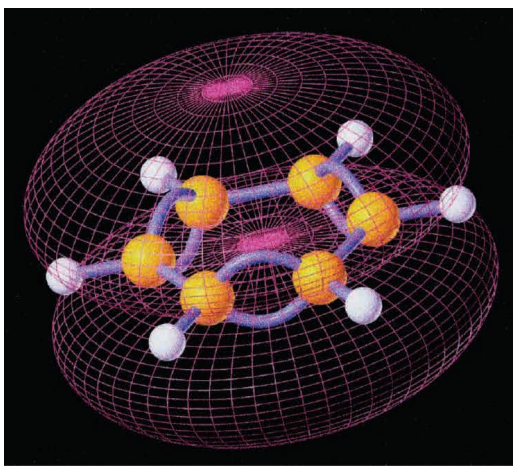


π – deslocalizado

Estructuras resonantes







4.3 Carácter aromático. La regla 4n + 2 de Hückel

¿Cuáles son las propiedades del benceno que un compuesto debe tener para ser considerado aromático? Además de las sustancias que contienen anillos bencénicos, hay muchas otras que se consideran aromáticas, a pesar de que, superficialmente, casi no guardan semejanza con el benceno.

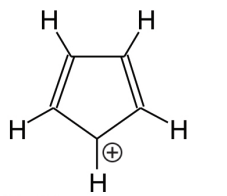
¿Qué propiedades tienen en común todos los compuestos aromáticos? Desde el punto de vista experimental, los compuestos aromáticos son sustancias, cuyas fórmulas moleculares muestran un alto grado de insaturación; a pesar de lo cual, son resistentes a las reacciones de adición (contrario a las reacciones de los alquenos). Los compuestos aromáticos, a menudo, sufren reacciones de sustitución electrofílica similares a las del benceno. Junto a la resistencia a la adición y, probablemente, a causa de ella, hay pruebas de una estabilidad inusual, como bajos calores de hidrogenación y combustión.

Las moléculas aromáticas son cíclicas; por lo general, presentan anillos de cinco, seis y siete átomos y el examen físico demuestra que tienen forma planar (o casi planar). Sus protones tienen el mismo tipo de desplazamiento químico en los espectros de RMN que en los del benceno y sus derivados.

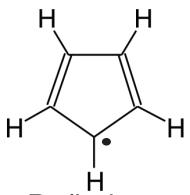
Desde un punto de vista teórico, para que una sustancia sea aromática, su molécula debe tener nubes cíclicas de "n" electrones deslocalizados encima y debajo del plano de la molécula; además, estas nubes deben contener (4n + 2) electrones pí. Esto significa que no basta la deslocalización para que resulte la estabilidad particular que caracteriza a un compuesto aromático. Debe haber un número específico de electrones pí: 2, 6 ó 10, etc. Este requisito, llamado regla del (4n + 2) o regla de Hückel, se basa en la mecánica cuántica y tiene que ver con el llenado de los diversos orbitales que conforman la nube pí . Los hechos confirman esta regla.

El benceno tiene seis electrones pi deslocalizados, el sexteto aromático (n=1), es cíclico, plano; por eso es aromático.

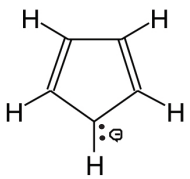
Otros compuestos que cumplen con las condiciones de aromaticidad son:



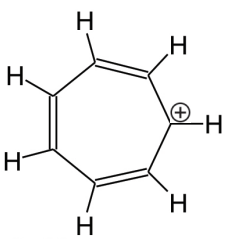
Catión
ciclopentadienilo
Cuatro electrones π



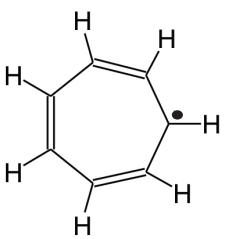
Radical
ciclopentadienilo
Cinco electrones π



Anión
ciclopentadienilo
Seis electrones π
Aromático

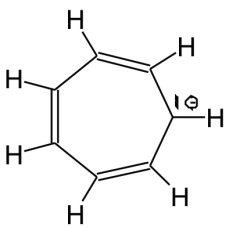


Catión
cicloheptatrienilo
(Ion tropilio)
Seis electrones π
Aromático



Radical
cicloheptatrienilo

Siete electrones π

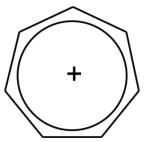


Anión
cicloheptatrienilo

Ocho electrones π

Las representaciones de los iones ciclopentadienilo y cicloheptrienilo (ion tropilio) como π- deslocalizado son:

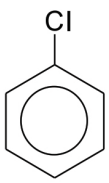
Anión
ciclopentadienilo



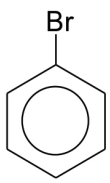
Catión
cicloheptatrienilo
(Ion tropilio)

4.4 Nomenclatura de los derivados del benceno

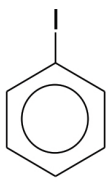
En algunos casos, basta anteponer el nombre del grupo sustituyente a la palabra benceno; por ejemplo: clorobenceno, bromobenceno, yodobenceno o nitrobenceno.



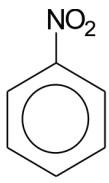
Clorobenceno



Bromobenceno

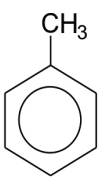


Yodobenceno

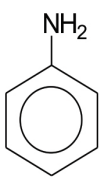


Nitrobenceno

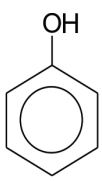
Otros derivados tienen nombres especiales que pueden carecer de semejanza con el nombre del grupo sustituyente. Por ejemplo, el metilbenceno se conoce como tolueno; el aminobenceno, como anilina; el hidroxibenceno, como fenol, etc. Algunos compuestos importantes son:



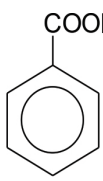
Tolueno



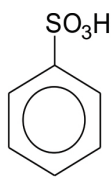
Anilina



Fenol

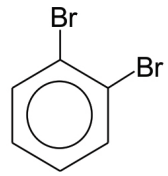


Acido benzoico

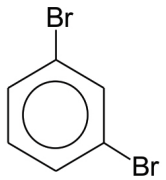


Acido
bencenosulfónico

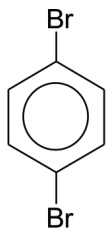
Si existen varios grupos unidos al anillo bencénico, es necesario no solo identificar cuáles son, sino también indicar su ubicación relativa en el anillo. Los tres isómeros posibles para bencenos disustituidos se caracterizan con los prefijos orto, meta y para, abreviados como o-, m- y p. Por ejemplo:



o-Dibromobenceno
orto

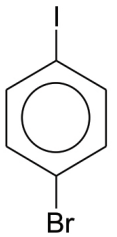


m-Dibromobenceno
meta

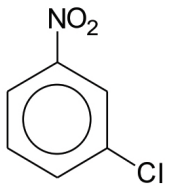


p-Dibromobenceno
para

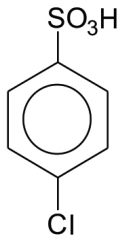
Si los dos grupos son diferentes, y ninguno confiere un nombre especial a la molécula, se nombran sucesivamente y se finaliza con la palabra benceno. Si uno de los dos grupos es del tipo que da a la molécula un nombre especial, el compuesto se nombra como un derivado de la molècula especial.



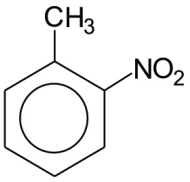
p-Bromoyodobenceno



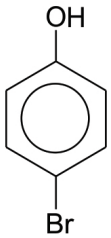
m-Cloronitrobenceno



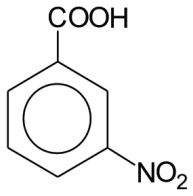
p-clorobencenosulfónico



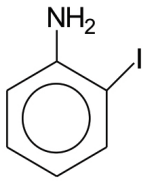
o-Nitrotolueno



p-Bromofenol

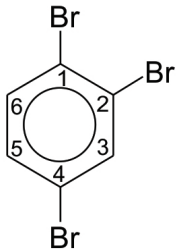


Acido
m-nitrobenzoico

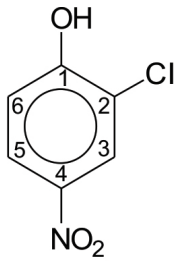


o-Yodoanilina

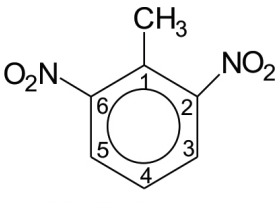
Si el anillo bencénico tiene unidos más de dos grupos, se utilizan números para indicar sus posiciones relativas. Por ejemplo:



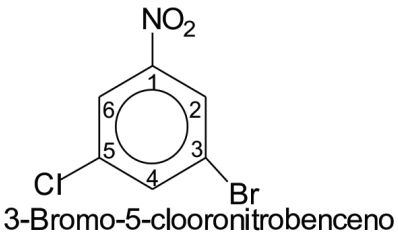
1,2,4-Tribromobenceno



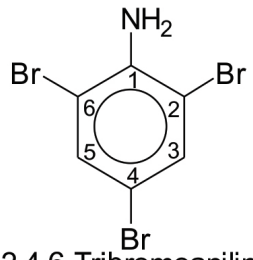
2-Cloro-4-nitrofenol



2,6-Dinitrotolueno



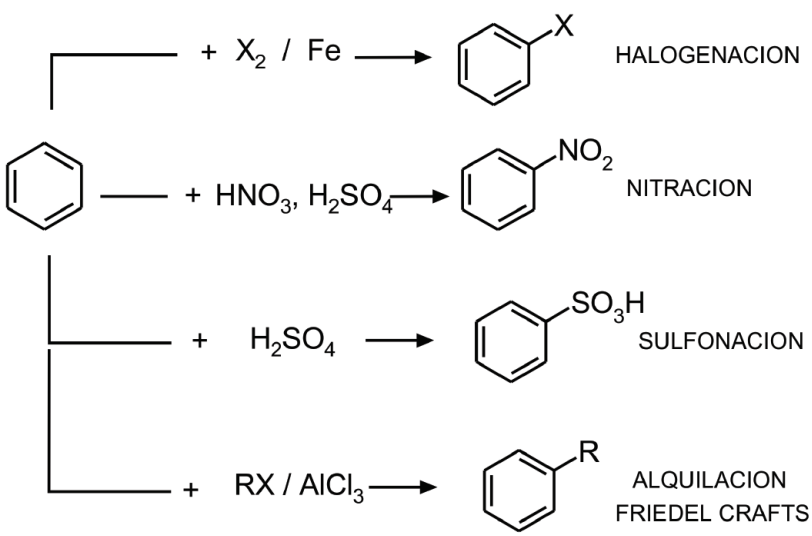
3-Bromo-5-clooronitrobenceno



2,4,6-Tribromoanilina

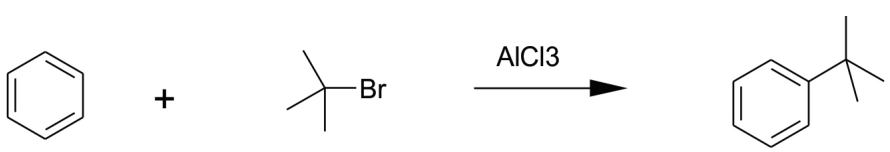
4.5 Reacciones del benceno

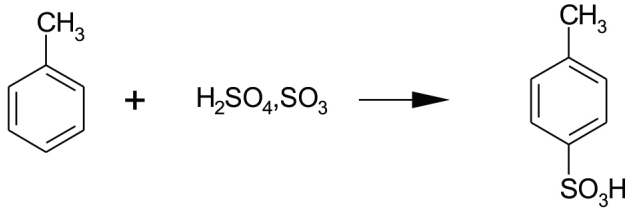
El benceno, al igual que los compuestos aromáticos, presentan reacciones de sustitución electrofílica.
Las principales reacciones del benceno y derivados son las siguientes:

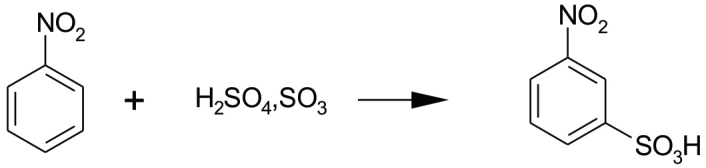


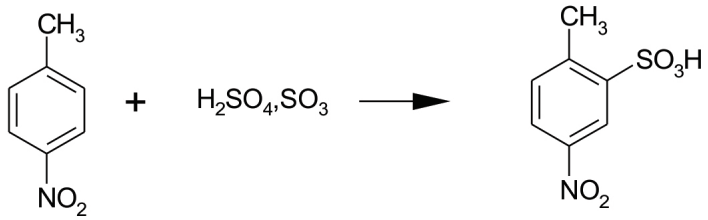
Una posterior sustitución en el anillo aromático, depende del grupo (-R) presente. Así, si R= -X, -Radical alquílico, -NH_2, -NHR,- NR_2, -OH, -OR, la sustitución es en las posiciones orto- y para-. Si R = -COOH, -$CONH_2$, -CONHR, -$CONR_2$, -SO_3H, -NO_2, -CN, -CHO, -COR, la sustitución es en la posición meta-.

Si existen dos grupos en el anillo, el grupo que orienta la sustitución en posición orto o para es el que predomina.





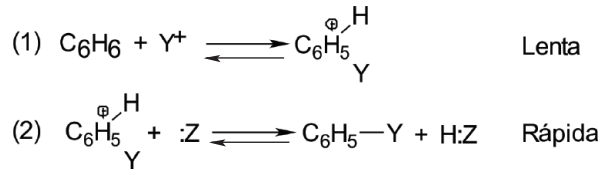




4.6 Mecanismos de reacción

Mecanismo de la sustitución electrofílica

Cualquiera que sea el reactivo específico involucrado, se asume que las reacciones de sustitución electrofílica aromática proceden por un solo mecanismo. Para el reactivo YZ:



El mecanismo comprende dos pasos esenciales:
1) Ataque de un reactivo electrofílico al anillo, para formar un carbocatión:

2) Extracción de un protón al carbocatión por alguna base.
En cada caso, hay una reacción ácido-base preliminar que genera la partícula atacante.
Sin embargo, la verdadera sustitución está contenida en estos dos pasos.

a. Nitración

(1) $HONO_2 + 2H_2SO_4 \rightleftharpoons H_3O^+ + 2HSO_4^- + {}^{\oplus}NO_2$ (ion nitronio)

(2) ${}^{\oplus}NO_2 + C_6H_6 \longrightarrow C_6H_5(H)(NO_2)$ Lenta

(3) $C_6H_5(H)(NO_2) + HSO_4^- \longrightarrow C_6H_5{-}NO_2 + H_2SO_4$ Rápida

b. Sulfonación

(1) $2H_2SO_4 \rightleftharpoons H_3O^+ + HSO_4^- + SO_3$

(2) $SO_3 + C_6H_6 \rightleftharpoons C_6H_5(H)(SO_3^-)$ Lenta

(3) $C_6H_5(H)(SO_3^-) + HSO_4^- \rightleftharpoons C_6H_5{-}SO_3^- + H_2SO_4$ Rápida

(4) $C_6H_5{-}SO_3^- + H_3O^+ \rightleftharpoons C_6H_5{-}SO_3H + H_2O$ Equilibrio muy a la izquierda

c. Alquilación de Friedel-Crafts

(1) $RCl + AlCl_3 \rightleftharpoons AlCl_4^- + R^{\oplus}$

(2) $R^{\oplus} + C_6H_6 \longrightarrow C_6H_5(H)(R)$ Lenta

(3) $C_6H_5(H)(R) + AlCl_4^- \longrightarrow C_6H_5{-}R + HCl + ACl_3$ Rápida

d. Halogenación

(1) $Cl_2 + FeCl_3 \rightleftharpoons Cl_3Fe^{\ominus}{-}Cl^{\oplus}{-}Cl$

(2) $Cl_3Fe{-}Cl{-}Cl + C_6H_6 \rightleftharpoons C_6H_5(H)(Cl) + FeCl_4^-$ Lenta

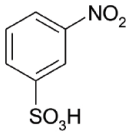
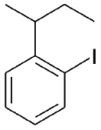
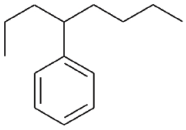
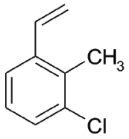
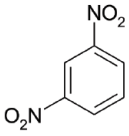
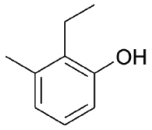
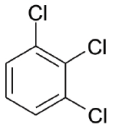
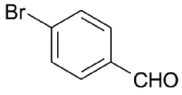
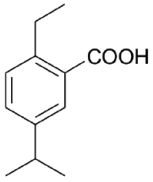
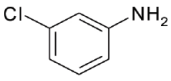
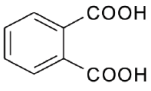
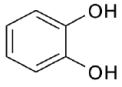
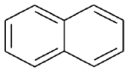
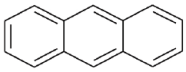
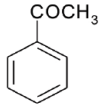
(3) $C_6H_5(H)(Cl) + FeCl_4^- \longrightarrow C_6H_5{-}Cl + HCl + FeCl_3$ Rápida

Práctica de aula - compuestos aromáticos

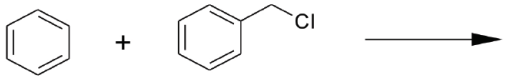
1. En la siguiente relación de compuestos, ¿cuáles compuestos son aromáticos?. ¿Por qué?

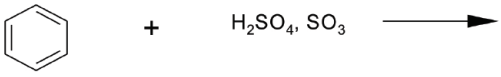
a)
b)
c)
d)

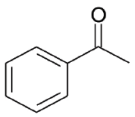
2. Nombrar los siguientes compuestos:

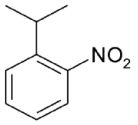
a) 
b) 
c) 
d) 
e) 
f) 
g) 
h) 
i) 
j) 
k) 
l) 
m) 
n) 
o) 

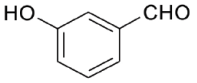
3. Completar las siguientes reacciones químicas:

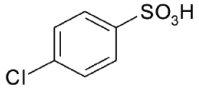
a) 

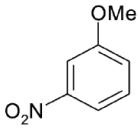
b) 

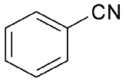
c)  + Br_2 / Fe ⟶

d)  + Cl_2 / Fe ⟶

e)  + HNO_3, H_2SO_4 ⟶

f)  + Br_2 / Fe ⟶

g)  + HNO_3, H_2SO_4 ⟶

h)  + H_2SO_4, SO_3 ⟶

5. Alcoholes

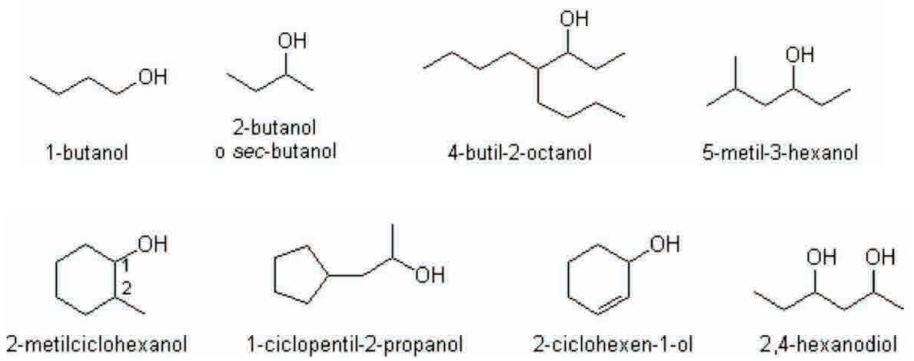
5.1 Grupo funcional

-OH (hidroxilo)
Fórmula general: $C_nH_{2n+1}OH$

Los alcoholes son compuestos que tienen grupos hidroxilos unidos a átomos de carbonos no saturados, con hibridación sp^3. Esta definición excluye a los fenoles (grupos hidroxilo unidos a anillos aromáticos) y los enoles (grupo hidroxilo unido a un carbono con doble enlace, también llamado vinílico), debido a que la química de estos tres tipos de compuestos es diferente. Los alcoholes pueden considerarse como derivados orgánicos del agua, donde uno de los hidrógenos es sustituido por un grupo orgánico (R-): H-O-H pasa a ser R-OH.

5.2 Nomenclatura

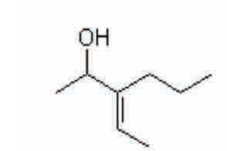
Los alcoholes se nombran cambiando el sufijo "ano" del alcano correspondiente a la cadena principal por ol. La cadena principal del compuesto debe contener al carbono enlazado al grupo -OH; a tal átomo de carbono se le debe asignar el número más bajo posible. De forma análoga a los alquenos, se debe especificar la posición del grupo funcional -OH.



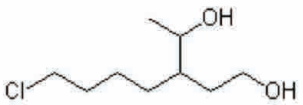
Cuando existe más de un mismo grupo funcional, (por ejemplo dos hidroxilos) se utilizan los prefijos di, tri, etc. antes de la terminación propia al grupo; por ejemplo: diol, triol, etc. Además, la cadena principal debe tener el máximo número del grupo funcional.

En un alqueno como el 2-hexeno o en un alcohol saturado como el 2-hexanol, el índice 2 indica la posición del doble enlace y del hidroxilo, respectivamente. La presencia de un doble enlace carbono-carbono u otro grupo funcional correspondiente a alcoholes, cetonas, aminas, etc., el índice correspondiente a la posición del grupo -OH se indica antes del sufijo y el del alqueno normal. De esta forma, 4-hexen-2-ol indica una cadena de 6 carbonos con enlace doble entre el carbono 4 y el 5 y un grupo -OH en el carbono 2; además, la cadena principal es la que contiene el grupo funcional y el máximo número de enlaces dobles y

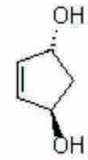
triples. En el siguiente ejemplo, la cadena principal no es la más larga (6 carbonos), sino la que tiene al doble enlace (5 carbonos).



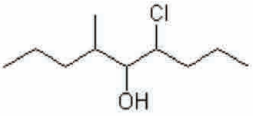
3-propil-3-penten-2-ol
incorrecto:
3-etiliden-2-hexanol



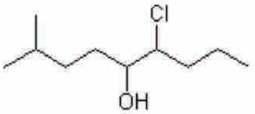
3-(4-clorobutil)-1,4-pentanodiol



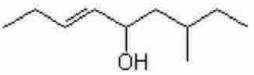
trans-4-ciclopenten-1,3-diol



4-cloro-6-metil-5-nonanol



6-cloro-2-metil-5-nonanol



trans-7-metil-3-nonen-5-ol

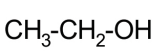
5.3 Fuentes

Muchos alcoholes son obtenidos por fermentación de frutas o granos con levadura; sólo el etanol es producido comercialmente de esta manera, para uso como combustible y como bebida. Otros alcoholes son, generalmente, producidos como derivados sintéticos del gas natural o del petróleo.

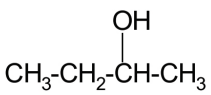
5.4 Propiedades generales

Los alcoholes primarios y secundarios son líquidos incoloros y de olor agradable, solubles en agua en cualquier proporción y menos densos que ella. Todos los alcoholes terciarios son sólidos. En general, los alcoholes son compuestos polares y forman enlaces por puente de hidrógeno.

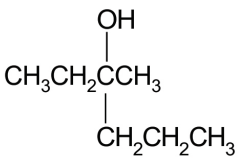
Los alcoholes se clasifican en:
Primarios: $R\text{-}CH_2\text{-}OH$
Secundarios: $(R)_2\text{-}CH\text{-}OH$
Terciarios: $(R)_3\text{-}C\text{-}OH$



alcohol primario



alcohol secundario



alcohol terciario

5.5 Usos

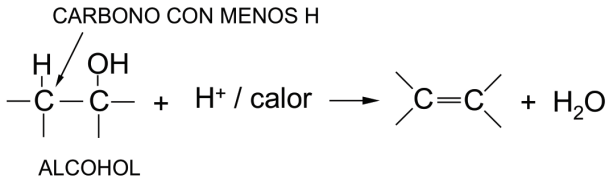
Los alcoholes tienen diversos usos en la industria y la ciencia como solventes y combustibles. El etanol y el metanol pueden usarse como combustibles de una manera más limpia que la gasolina o el gasoil. Por su baja toxicidad y disponibilidad para disolver sustancias no polares, el etanol es utilizado frecuentemente, como solvente en fármacos, perfumes y en esencias como la vainilla. El mentol, un alcohol aislado de la menta, se usa mucho como saborizante y en perfumería; y el colesterol, un alcohol esteroide, cuya fórmula es complicada, se considera un agente que causa enfermedades del corazón. Los alcoholes sirven; a menudo, como intermediarios versátiles en síntesis orgánica.

Efectos físicos del alcohol en el organismo

1. La asimilación del etanol por el organismo se inicia desde el momento mismo de la ingesta. Un pequeño porcentaje se absorbe a través de la boca y el esófago.
2. Otro pequeño porcentaje de alcohol es absorbido en el estómago (20% a 30% del alcohol bebido se absorbe en las vías digestivas superiores y el estómago). El etanol erosiona la mucosa del estómago el que, al quedar desprotegido, el jugo gástrico y lo ingerido producen la sensación de acidez y dolor. Si el ataque a la mucosa se hace constantemente se puede originar una gastritis.
3. En el intestino delgado, se absorbe el 70 - 80% del alcohol consumido; ingresa al torrente sanguíneo y es llevado al hígado por la vena porta.
4. En el hígado las células hepáticas metabolizan el alcohol, transformándolo en sustancia útil para el organismo (rico en calorías usado como fuente de energía). Alcohol (tóxico)----->acetaldehído----->Acetato.
5. El exceso de alcohol ocasiona el desgaste de las reservas de glicógeno en el hígado y los músculos. La falta de glicógeno disminuye los azúcares en la sangre y provoca una sensación de debilidad y agotamiento físico.
6. Debido al insuficiente trabajo del hígado, el etanol invade el torrente sanguíneo y se distribuye por todos los tejidos del cuerpo. A los 30 - 90 minutos después de la ingesta, el nivel de alcohol en la sangre es máximo.
7. En los riñones, el alcohol inhibe la función de la hormona vasopresina, lo que ocasiona que se elimine más agua de la que se ingiere (el agua que el organismo necesita es obtenida de órganos como el cerebro).

5.6 Reacciones químicas

a. Deshidratación



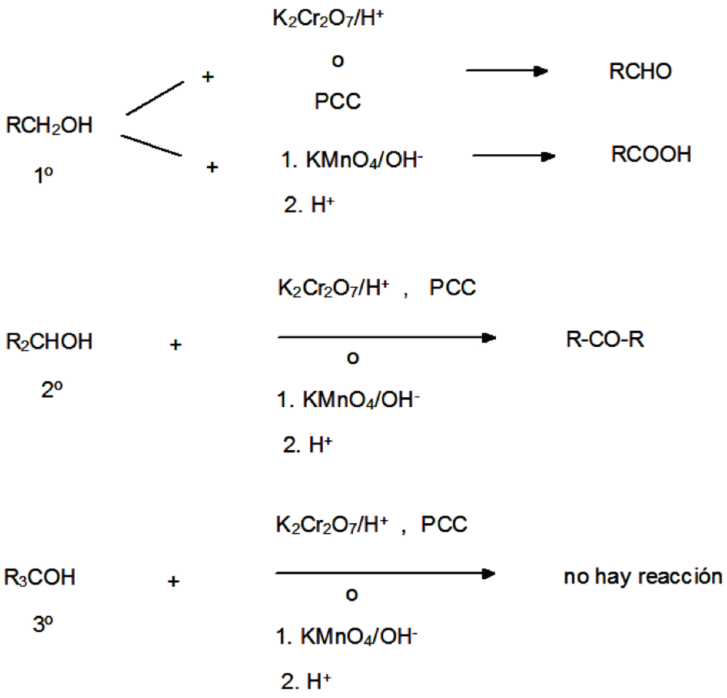
b. Con metales activos

c. Oxidación

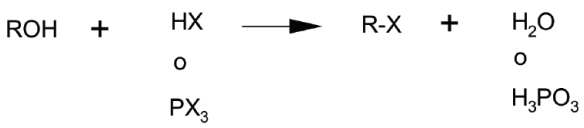
Un compuesto orgánico se oxida cuando gana oxígenos o pierde hidrógenos. Los agentes oxidantes más comunes son:

$KMnO_4$ / OH-, $K_2Cr_2O_7/H^+$ y clorocromato de piridinio (PCC)

Los alcoholes pueden ser oxidados sólo por oxidantes fuertes.



d. Formación de haluros alquílicos



Práctica de aula - alcoholes

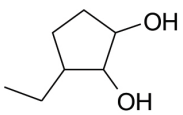
1. Dibujar y nombrar todos los alcoholes de fórmula molecular C5H12O. Clasificar cada isómero como primario, secundario o terciario.
2. Nombrar los siguientes compuestos:

a) CH_3-CH_2-CHOH-CH(CH_3)CH_3

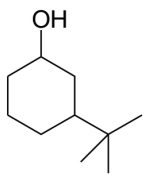
b) $(CH_3)_2CHCH_2CHOHCHOHCH_3$

c) $CH_3CH_2CHOHCH_2CHBr_2$

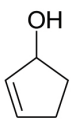
d)



e)



f)



3. Escribir las fórmulas estructurales de los siguientes compuestos:
   a. 4-metil-2-pentanol
   b. 2-cloro-3-isopropilciclohexanol
   c. 2,4,4-trimetil-2-heptanol
   d. alcohol bencílico
   e. 3-t-butil-1,2-ciclohexanodiol

4. Identificar el error en cada uno de los siguientes nombres. Escribir el nombre y la fórmula correcta.

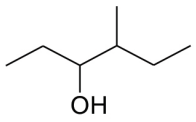
   a) 1,1-dimetil-1-propanol
   b) 2-propil-2-pentanol
   c) 4-metil-4-hexanol
   e) 2,2-dimetil-3-cloro-3-butanol

5. El $CH_3CH_2CH_2CH_2OH$ y el $CH_3CH_2OCH_2CH_3$ son isómeros. En base a su estructura, ¿cuál se esperaría que tenga la mayor presión de vapor, mayor punto de ebullición y mayor solubilidad en agua?

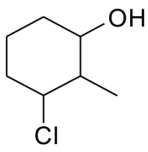
6.Escribir el significado de:

   a. etanol absoluto
   b. etanol desnaturalizado
   c. etanol grado 86

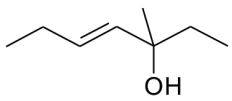
7. Completar las siguientes reacciones químicas:

a 

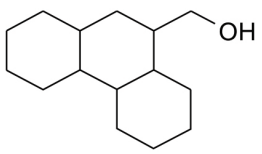
+ H^+ / calor ⟶

b 

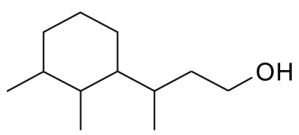
+ PCC ⟶

c 

+ $K_2Cr_2O_7$ / H^+ ⟶

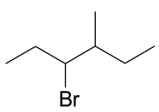
d 

1. $KMnO_4$ / OH^- ⟶

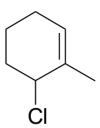
e 

+ Na ⟶

8. Completar la siguiente secuencia de reacciones:

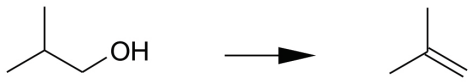
a) 

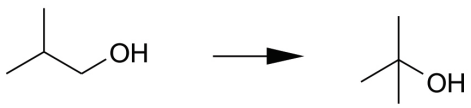
+ KOH / ol ⟶ A + H_2O / H^+ ⟶ B + $K_2Cr_2O_7$ / H^+ ⟶ C

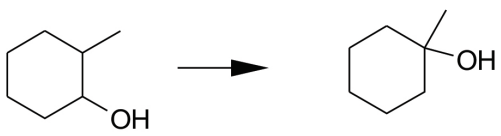
b) 

+ H_2O / H^+ ⟶ A + HCl ⟶ B

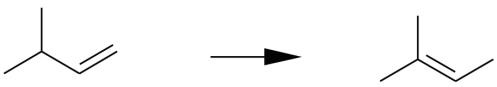
9. Las siguientes reacciones pueden realizarse en una o dos etapas. Formular la secuencia de reacciones que permita obtener el producto indicado.

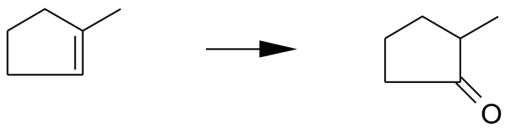
a) 

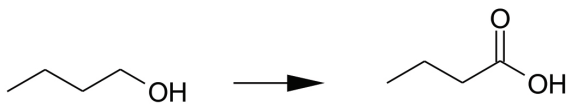
b) 

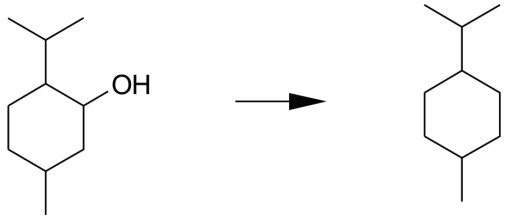
c) 

d)

e) 

f) 

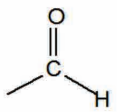
g) 

h) 

6. Aldehídos y cetonas

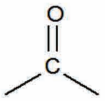
6.1 Estructura y propiedades

Grupo funcional



Formilo

Aldehídos



Carbonilo

Cetonas

Los aldehídos y cetonas tienen menores puntos de ebullición que los de los alcoholes de masa molecular similar, debido a que no pueden formar enlaces por puentes de hidrógeno. Sin embargo, por el grupo carbonilo polar, tienen mayores puntos de ebullición, que de moléculas no polares con masa molecular semejante. Por ejemplo:

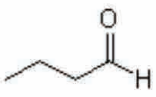
$CH_3CH_2CH_2OH$	CH_3CH_2CHO	$CH_3CH_2CH_2CH_3$
p.e. = 97ºC	p.e. = 49ºC	p.e. = -0,5ºC

Los aldehídos y cetonas de bajo peso molecular son solubles en agua; no pueden formar enlaces de hidrógeno ente sí, pero sí lo hacen con el agua. Los compuestos de elevado peso molecular son insolubles.

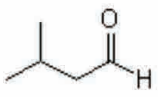
6.2 Nomenclatura

Aldehídos

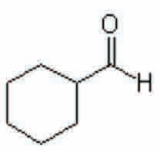
Los nombres de los aldehídos se derivan del nombre del alcano con el mismo número de átomos de carbono. La "o" final del alcano se reemplaza con el sufijo "al". El grupo funcional formilo siempre está al final de una cadena, no es necesario especificar su posición en el nombre, pero le corresponde el número 1 de la cadena. Aldehídos más complejos en los que el grupo -CHO está enlazado a un anillo utilizan el sufijo carbaldehído en lugar de "al".



butanal

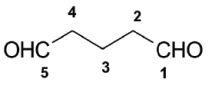


3-metilbutanal

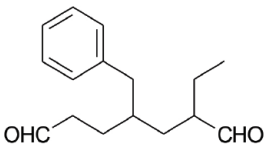


ciclohexanocarbaldehído

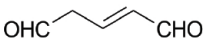
El sufijo “dial” indica la presencia de dos grupos formilos (-CHO).



Pentanodial



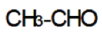
4-Bencil-2-etilheptanodial



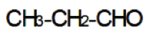
2-pentenodial

Los nombres triviales se derivan de los nombres de los ácidos carboxílicos correspondientes.

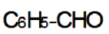
Formaldehído



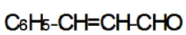
Acetaldehído



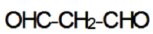
Propionaldehído



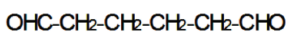
Benzaldehído



Cinamaldehído



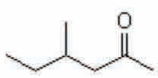
Malonaldehído



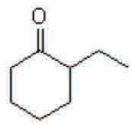
Adipaldehído

Cetonas

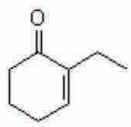
Se remplaza la terminación “o” de la cadena principal por “ona”, se numera la cadena más larga, de forma tal que se asigne al grupo carbonilo el dígito más bajo posible; esta posición se asocia en el nombre del compuesto.



4-metil-2-hexanona

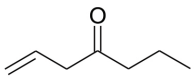


2-etilciclohexanona

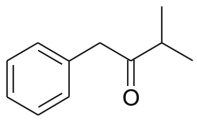


2-etil-2-ciclohexen-1-ona

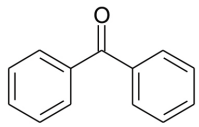
También se puede usar el método radicofuncional:



Alil propil cetona

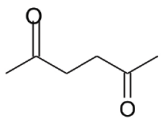


Bencil isopropil cetona

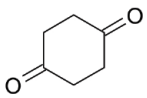


Difenil cetona

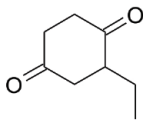
Dos o más grupos funcionales se indican con los sufijos: “diona”, “triona”, etc.



2,5-Hexanodiona



1,4-Ciclohexanodiona

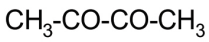


2-Etil-1,4-ciclohexanodiona

Se conservan los siguientes nombres:

CH_3-CO-CH_3

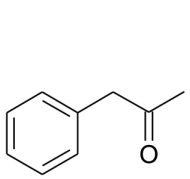
Acetona



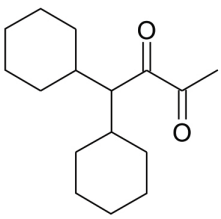
CH_3-CO-CO-CH_3

Diacetilo

Estos nombres se pueden usar para nombrar algunos derivados:

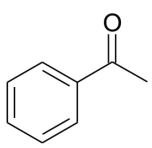


Fenilacetona

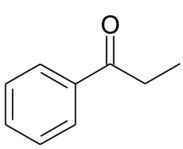


1,1-Diciclohexildiacetilo

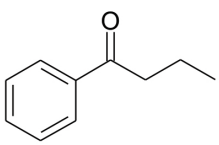
Las fenil o naftil alquil cetonas pueden ser nombradas como "fenonas" o "naftonas":



Acetofenona



Propiofenona



Butirofenona

6.3 Aplicaciones

Formaldehído. Su solución acuosa se denomina formalina o formol y se utiliza como preservativo de especímenes biológicos; también, como ingrediente en la fabricación de papel, madera triplex, aislantes caseros, cueros, drogas, cosméticos y polímeros.

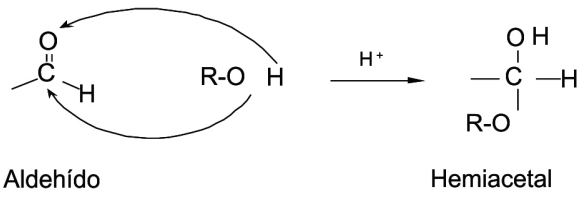
Acetaldehído. Se utiliza en la fabricación de colorantes, cauchos, plásticos y ácido acético.

Acetona. Se utiliza como solvente. Es el constituyente principal de los disolventes de esmaltes.

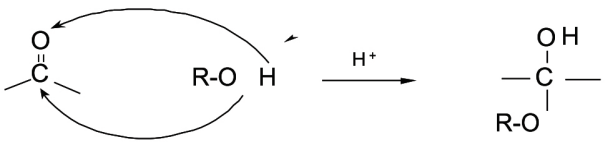
6.4 Reacciones

Se caracterizan porque presentan reacciones de adición acil nucleofílica

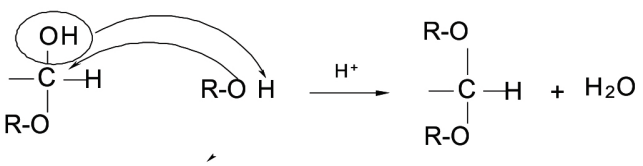
a. Adición de alcohol



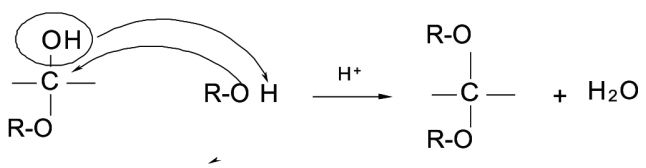
Aldehído Hemiacetal



Cetona Hemicetal

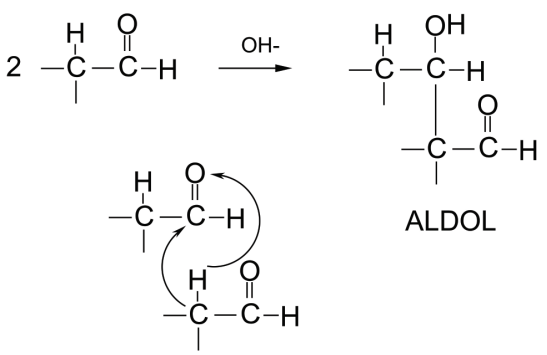


Hemiacetal Acetal

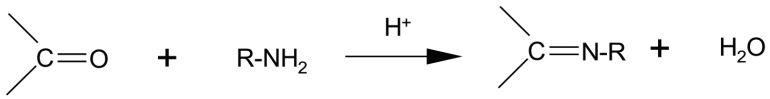


Hemicetal Cetal

b. Autoadición



c. Adición de aminas



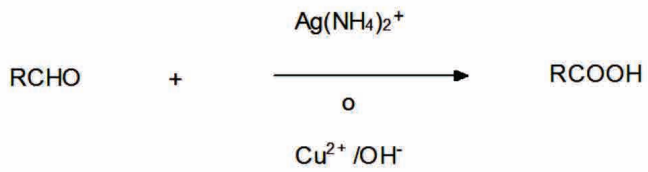
d. Oxidación

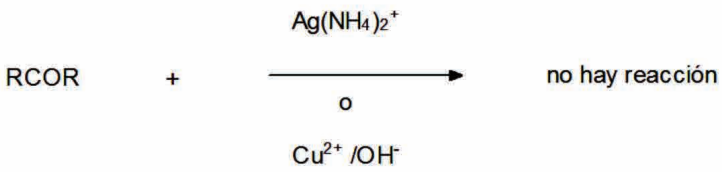
Agentes oxidantes suaves:

$Ag(NH_3)_2^+$ (Reactivo de Tollen's)

Cu^2+ /OH- (Reactivo de Fehling)

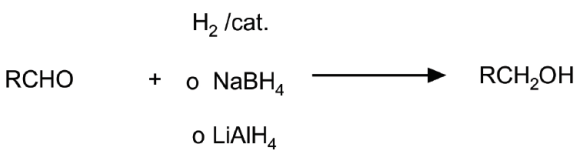
Los aldehídos pueden oxidarse con agentes oxidantes suaves y también fuertes, pero no las cetonas.

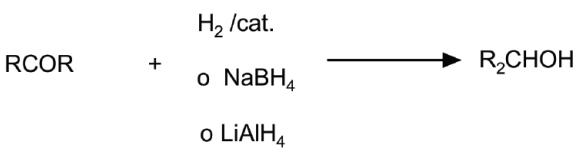


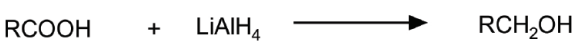


e. Reducción

Un compuesto orgánico se reduce cuando gana hidrógenos o pierde oxígenos.
Los agentes reductores más comunes son: H_2 /cat., $NaBH_4$, $LiAlH_4$







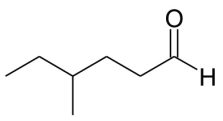
Práctica de aula-aldehídos y cetonas

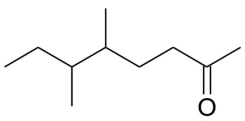
1. Dibujar y nombrar los aldehídos y cetonas isómeros, de fórmula molecular $C_5H_{10}O$.

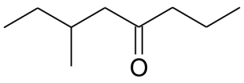
2. Escribir la fórmula estructural de los siguientes compuestos:

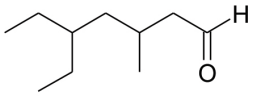
   a. 3,3-dimetilbutanal
   b. propionaldehído
   c. 2-pentenal
   d. 4-hexen-2-ona
   e. ciclopentatona
   f. 2-etil-3-yodoheptanal
   g. 2,3-butanodiona

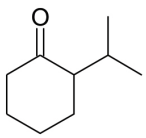
3. Nombrar los siguientes compuestos:

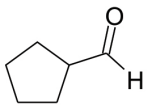
a) 

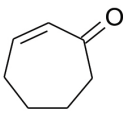
b) 

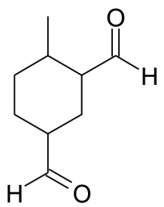
c) 

d) 

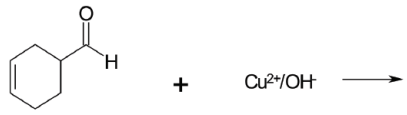
e) 

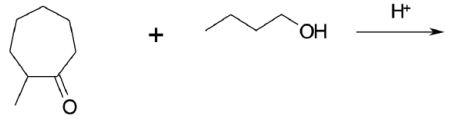
f) 

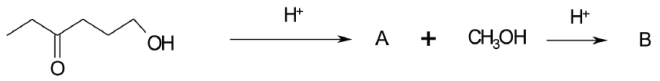
g) 

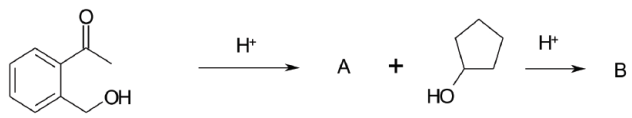
h) 

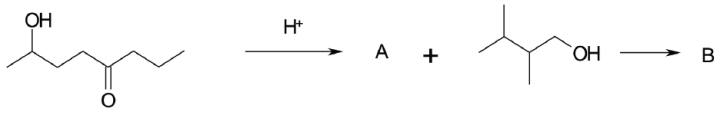
4. Completar las siguientes reacciones:

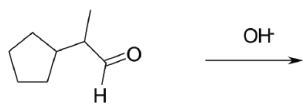
a) 

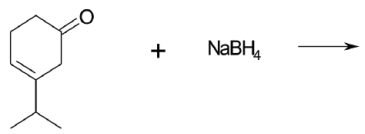
b) 

c) 

d) 

e) 

f) 

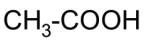
g) 

7. Ácidos carboxílicos y derivados

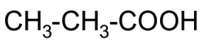
7.1 Ácidos carboxílicos

a. Nomenclatura

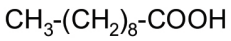
El nombre de los ácidos carboxílicos se forma anteponiendo la palabra ácido y cambiando la "o" final del alcano correspondiente por "oico". El carbono carboxílico siempre le corresponde la posición 1, de la cadena más larga.



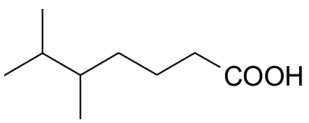
Acido etanoico



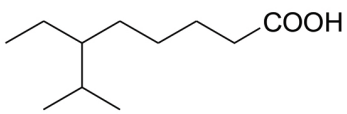
Acido propanoico



Acido decanoico

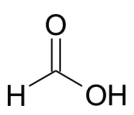


Acido 5,6-dimetilheptanoico

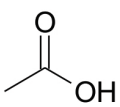


Acido 6-etil-7-metiloctanoico

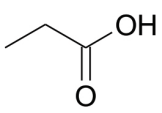
Existe una gran cantidad de ácidos con nombres comunes, que aún son ampliamente usados: fórmico, acético, benzoico (ya mencionado en compuestos aromáticos).



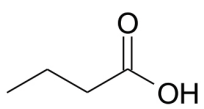
Acido fórmico



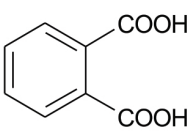
Acido acético



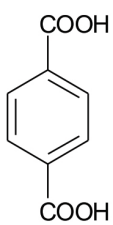
Acido propiónico



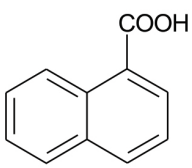
Acido butírico



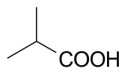
Acido ftálico



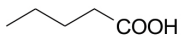
Acido tereftálico



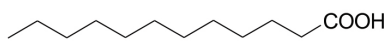
Acido 1-naftoico



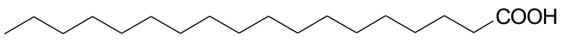
Acido isobutírico



Acido valérico

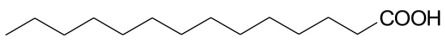


Acido láurico

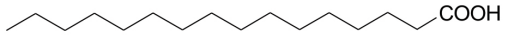


Acido esteárico

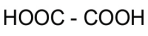
Acido piválico



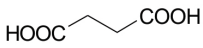
Acido mirístico



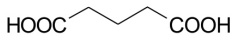
Acido palmítico



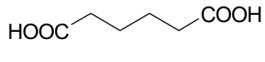
Acido oxálico



Acido succínico

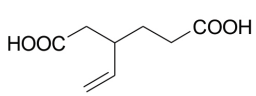


Acido glutárico

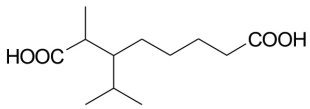


Acido adípico

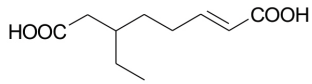
La presencia de dos grupos carboxilos se denota con el sufijo "dioico":



Acido 3-vinilhexanodioico

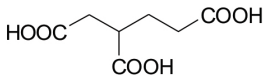


Acido 2-etil-3-isopropiloctanodioico

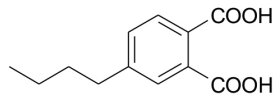


Acido 6-etil-2-octenodioico

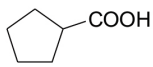
Los ácidos carboxílicos también pueden ser nombrados como derivados de los respectivos hidrocarburos.



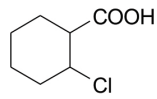
Acido 1,2,4-butanotricarboxílico



Acido 4-butil-1,2-bencenodicarboxílico



Acido ciclopentanocarboxílico

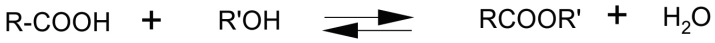


Acido 2-clorociclohexanocarboxílico

b. Reacciones químicas

Acidez

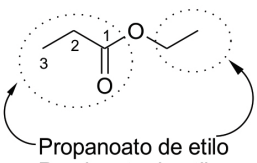
Formación de ésteres



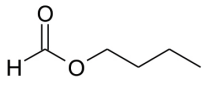
7.2 ESTERES

NOMENCLATURA

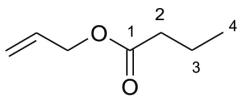
Los ésteres reciben nombres como si fueran sales inorgánicas. La terminación "ico" del ácido correspondiente se cambia a "ato" y, luego, se menciona el grupo alcohoxilo con la terminación "ilo", separando las dos palabras con la palabra "de".



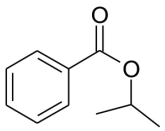
Propanoato de etilo
Propionato de etilo



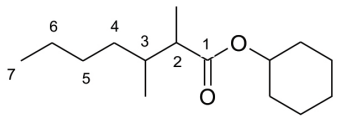
Metanoato de butilo
Formiato de butilo



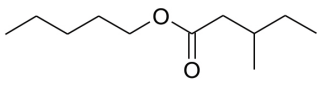
Butanoato de alilo
Butirato de alilo



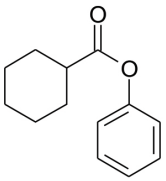
Benzoato de isopropilo



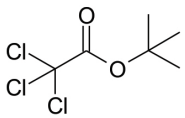
2,3-Dimetilheptanoato de ciclohexilo



3-Metilpentanoato de pentilo



Ciclohexanocarboxilato de fenilo

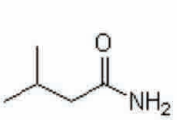


Tricloroacetato de t-butilo

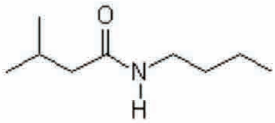
7.3 Amidas

Nomenclatura

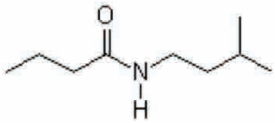
Las amidas se nombran a partir del ácido que les da origen, eliminando la palabra ácido y cambiando la terminación "oico" o "ico" por "amida" o la terminación carboxílico por carboxamida. Si la amida tiene sustituyentes alquílicos en el átomo de nitrógeno, se indica su posición con el prefijo *N*-.



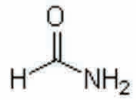
3-metilbutanamida



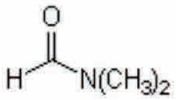
N-butil-3-metilbutanamida



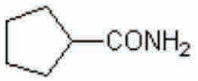
N-(3-metilbutil)butanamida



formamida



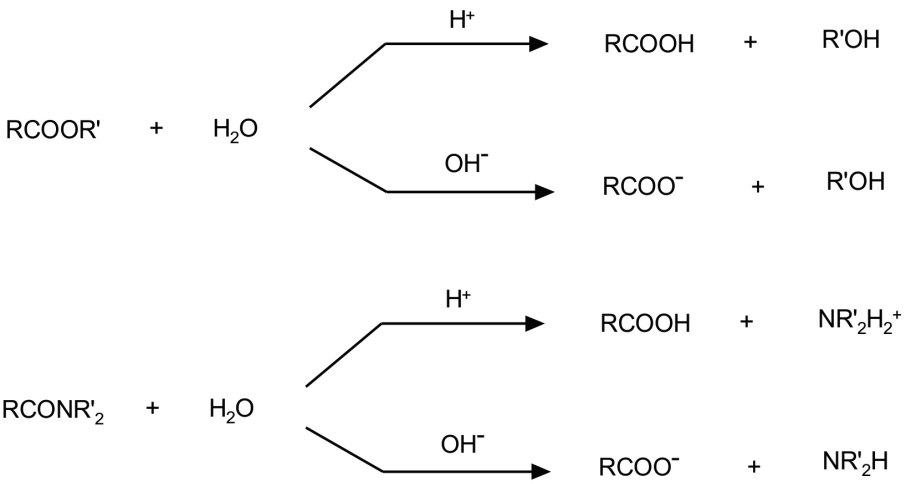
N,N-dimetilformamida



ciclopentanocarboxamida

7.4 Reacciones de hidrólisis de esteres y amidas

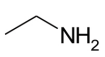
Se caracterizan porque el reactivo es agua y puede realizarse en medio ácido o básico:



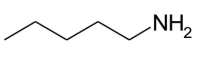
8. Aminas

8.1 Nomenclatura

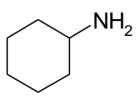
Las aminas primarias simples se nombran agregando el sufijo amina al nombre del sustituyente alquílico (metil, etil, etc.):



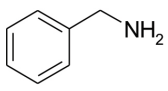
Etilamina



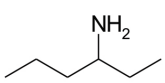
Pentilamina



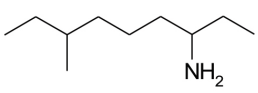
Ciclohexilamina



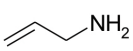
Bencilamina



1-Etilbutilamina

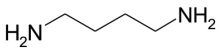


1-Etil-5-metilheptilamina

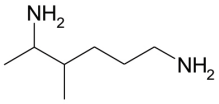


Alilamina

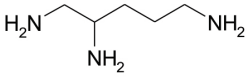
Diaminas y poliaminas primarias, donde los grupos amino están enlazados a una cadena alifática o núcleo cíclico, se nombran usando el sufijo diamina, triamina, etc.



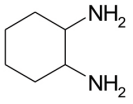
1,4-Butanodiamina



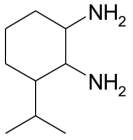
4-Metil-1,5-hexanodiamina



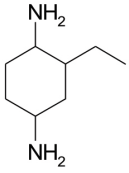
1,2,5-Pentanotriamina



1,2-ciclohexanodiamina

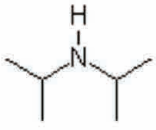


3-Isopropil-1,2-ciclohexano diamina

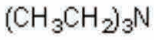


2- Etil-1,4-ciclohexanodiamina

Aminas secundarias y terciarias simétricas se nombran agregando los prefijos “di” y “tri” al nombre del grupo alquilo.

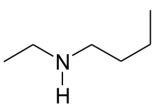


diisopropilamina

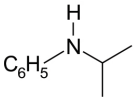


trietilamina

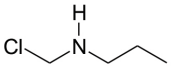
Aminas asimétricas se nombran como aminas primarias N-sustituidas. Se escoge el grupo alquilo más largo como principal y los otros grupos alquilos se consideran como sustituciones en el átomo de nitrógeno. Los sustituyentes en el átomo de nitrógeno se indican con el prefijo *N*-. También se pueden nombrar como el caso de aminas primarias.



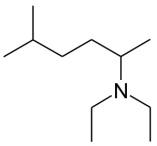
N-Etilbutilamina
Butiletilamina



N-isopropilanilina
fenilisopropilamina



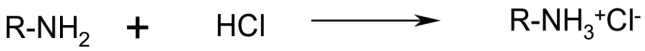
N-(Clorometil)propilamina
(Clorometil)propilamina



N,N-Dietil-1,4-dimetilpentilamina
(1,4-Dimetilpentil)dietilamina

8.2 Reacción de basicidad

Las aminas son bases débiles y reaccionan con ácidos inorgánicos formando sales de amonio



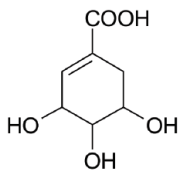
alquilamina — cloruro de alquilamonio

Practica de aula sobre ácidos carboxílicos, esteres, amidas y aminas

1. Escriba la fórmula estructural de los siguientes compuestos:

a.	Ácido cítrico	h.	Metilbencilamina
b.	Ácido α-hidroxibutírico	i.	N,N-Dietilhexanamida
c.	Acido ftálico	j.	2-(N-metilamino)-1-propanol
d.	Propanoato de isopropilo	k.	Piridina
e.	Ácido adípico	l.	Pirimidina
f.	Salicilato de metilo	m.	Pirrol
g.	Ácido acetilsalicílico	n.	p-Cloro-N-etilbenzamida

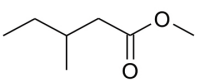
2. Considerar la estructura del ácido shiquímico:

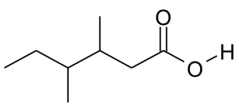


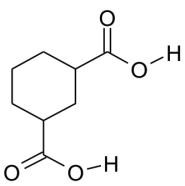
Formular el producto formado por este ácido y cada uno de los siguientes reactivos:

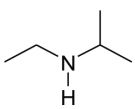
a. CH_3OH / H^+
b. 3 CH_3CH_2COOH / H^+
c. Br_2 / CCl_4
d. H_2 / Pt
e. NaOH
f. H_2O / H^+

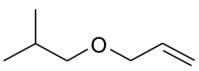
3. Escribir el nombre sistemático de los siguientes compuestos:

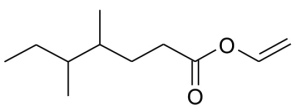
a) 

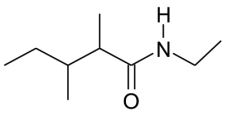
b) 

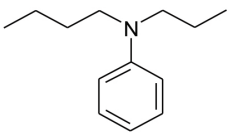
c) 

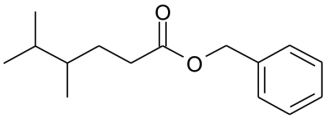
d) 

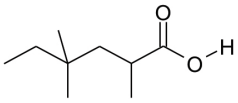
e) 

f) 

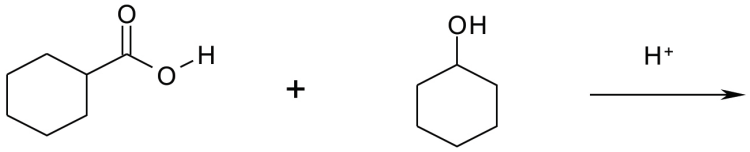
g) 

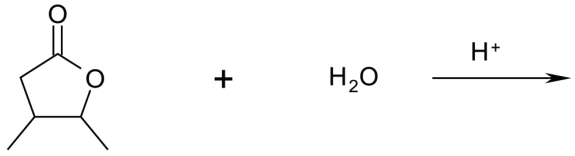
h) 

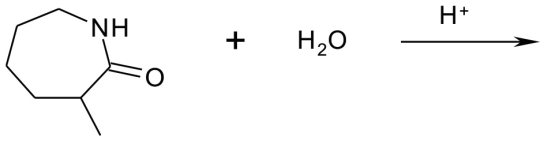
i) 

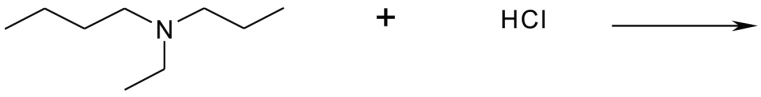
j) 

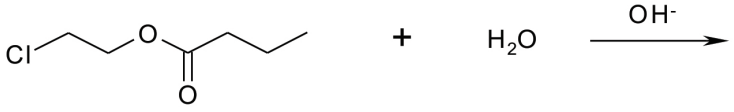
4. Completar las siguientes reacciones químicas:

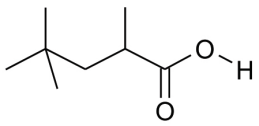
a) 

b) 

c) 

d) 

e) 

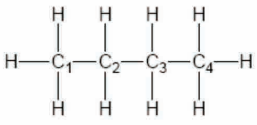
f)  + NaOH ⟶

9. Estereoisomería

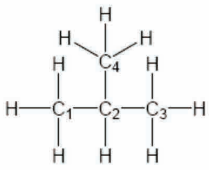
Isómeros son compuestos con igual fórmula molecular pero con diferente fórmula estructural y, en consecuencia, con propiedades físicas y/o químicas diferentes. Se clasifican en isómeros estructurales o de constitución y estereoisómeros.

9.1 ISÓMEROS ESTRUCTURALES

Son aquellos que difieren en el orden en el que se enlazan los átomos o el grupo funcional en la molécula. Comprende los isómeros de cadena, posición y funcional.



***n*-butano**



metilpropano

9.2 ESTEREOISÓMEROS

Se definen como isómeros que tienen la misma secuencia de átomos enlazados covalentemente, pero con distinta orientación espacial. Hay dos clases de esteroisómeros:

A. Isómeros conformacionales o confórmeros. Son aquellos que se interconvierten rápidamente a temperatura ambiente mediante rotaciones sobre enlaces sencillos. Esta clase de isómeros no pueden separarse. Comprende las conformaciones eclipsadas y alternadas o silla y bote.

B. Isómeros configuracionales. No pueden interconvertirse y, por tanto, pueden separarse. Hay dos clases:

a) Isómeros geométricos, que se originan por la distinta orientación espacial de átomos o grupo de átomos alrededor de un enlace doble o anillo. Pueden ser *cis-* y *trans-* o *E- y Z-* .
b) Isómeros ópticos, que se originan por la distinta orientación espacial de átomos o grupos de átomos alrededor de un carbono tetraédrico (hibridación sp^3). Esta clase de esteroisómero incluye a los enantiómeros, diasterómeros y compuesto meso.

Los **enantiómeros**, se relacionan entre sí por ser imágenes especulares no superponibles, tienen actividad óptica, rotan el mismo número de grados pero en sentidos opuestos (antípodas ópticas). La mezcla equimolar de enantiómeros (racemato) no tiene actividad óptica. El proceso de separación de enantiómeros se denomina resolución racémica.

Los ***diastereoisómeros* o *diasterómeros***, isómeros configuracionales que no son imágenes especulares uno del otro; por lo tanto, no son superponibles.

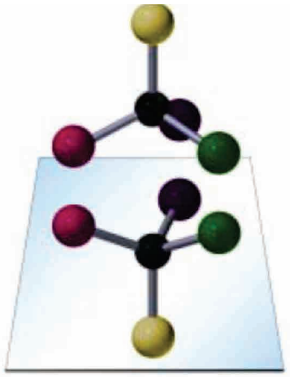
El **compuesto meso**, es un isómero que tiene centros quirales, pero forma imagen especular superponible y, en consecuencia, no tiene actividad óptica.

9.3 QUIRALIDAD: noción de centro esteroquímico. Nomenclatura R y S.

El tipo de estereoisomería más interesante es el que da lugar a la actividad óptica. A principios de siglo XIX, Biot señaló que algunas sustancias orgánicas de origen natural poseían la propiedad de girar el plano de la luz polarizada. Este fenómeno consiguió explicarse cuando los químicos comenzaron a considerar la disposición tridimensional de las moléculas en el espacio y la configuración tetraédrica del átomo de carbono. Las propiedades geométricas de un carbono con hibridación sp3 hacen que, en el caso de que esté unido a cuatro átomos o grupos de átomos diferentes, la molécula no tenga plano de simetría y que existan dos maneras diferentes de ordenar a los cuatro átomos o grupos de átomos. Estas dos ordenaciones o configuraciones generan dos formas isoméricas denominadas enantiómeros, que son imágenes especulares entre sí, pero no superponibles. Cuando esto ocurre, se dice que la molécula es quiral y óptimamente activa, puesto que es capaz de desviar el plano de la luz polarizada. Dos enantiómeros desvían el plano de la luz polarizada en la misma magnitud pero en sentidos opuestos.

Al carbono con hibridación sp^3 que está unido a cuatro átomos o grupos de átomos diferentes se le denomina estereocentro o centro estereogénico.

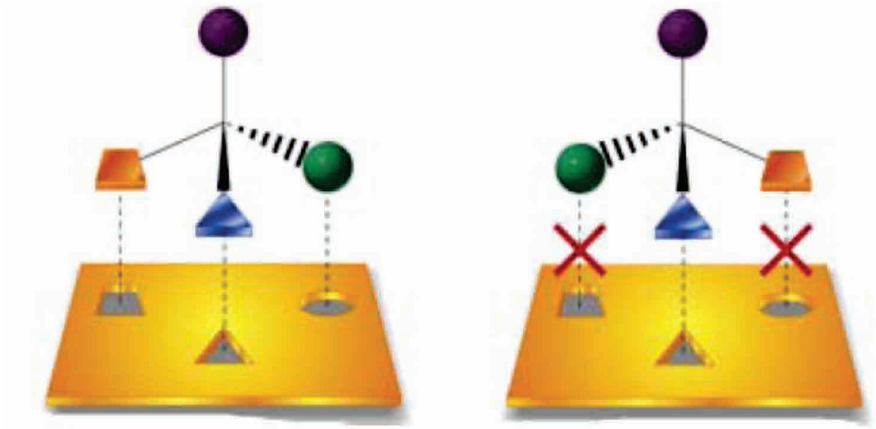
En la siguiente figura, se representa un compuesto de carbono con hibridación sp^3 unido a cuatro grupos diferentes, representados por cuatro colores distintos. El reflejo de esta estructura genera su enantiómero:



Carbono sp^3 y su imagen especular

En la siguiente representación se indican dos compuestos enantioméricos, cuyo estereocentro está unido a cuatro grupos diferentes simbolizados por dos esferas, una de color grana-

te y otra verde, un triángulo azul y un rectángulo naranja. Se observa la imposibilidad de superposición entre los enantiómeros.

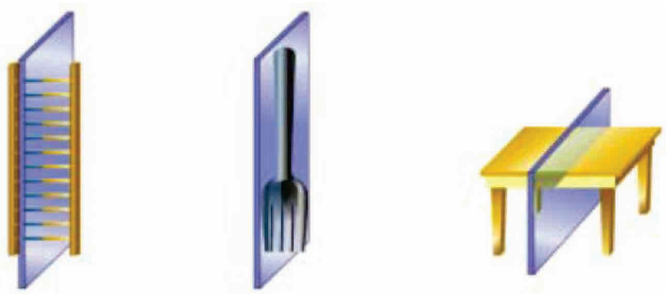


Imágenes especulares no superponibles

Cuando una molécula es superponible con su imagen especular se dice que no es ópticamente activa y, por tanto, es incapaz de desviar el plano de la luz polarizada. Esto ocurre cuando la molécula presenta un plano de simetría.

La quiralidad no es una propiedad exclusiva de las moléculas orgánicas que contienen estereocentros. En la vida ordinaria, se encuentran objetos quirales y, por tanto, no superponibles con su imagen especular, como la mano derecha y la mano izquierda, el pie derecho y el izquierdo, el zapato derecho y el izquierdo, etc.

Objetos quirales: no contienen plano de simetría



Objetos aquirales: presentan un plano de simetría

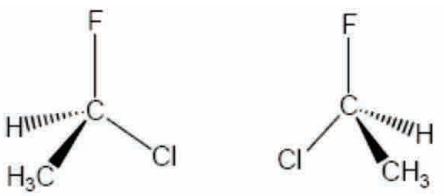
Nomenclatura de los isómeros configuracionales

El sistema más aceptado para nombrar la configuración de un centro estereogénico es la denominada convención de Cahn, Ingold y Prelog, que asigna una letra R o S a cada centro estereogénico de una molécula quiral.

Las reglas para asignar una configuración *R o S* son las siguientes:

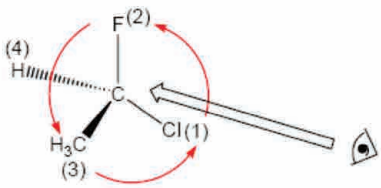
1. Cada átomo unido al carbono estereogénico recibe un número: 1, 2, 3 ó 4. El 1 se asigna al grupo de mayor prioridad y el 4 al de menor prioridad. La prioridad se establece según el número atómico: el átomo de mayor prioridad es el de mayor número atómico.
2. Una vez asignado el orden de prioridad, se mira el carbono estereogénico desde el lado opuesto al grupo de menor prioridad. Si el orden de prioridades decrecientes de los restantes grupos representa una secuencia en el sentido de las agujas del reloj se asigna al estereocentro la configuración R (*rectus*, derecha). Si la secuencia gira en el sentido opuesto a las agujas del reloj, la configuración del estereocentro es S (*sinister*, izquierda).

Ejemplo 1. Determinar la configuración R o S de los dos enantiómeros del 1-cloro-1-fluoroetano:

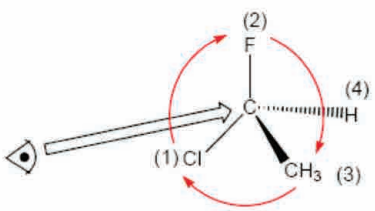


Se procede del siguiente modo:

1. El orden de prioridad de los grupos unidos al carbono estereogénico en base al número atómico es, de mayor a menor: Cl > F > C > H. Por tanto, el orden de prioridad será Cl (1º), F (2º), C (3º) y H (4º).
2. Mirar al compuesto quiral desde el lado opuesto al que ocupa el último grupo en prioridad, tal como se indica en los siguientes esquemas:

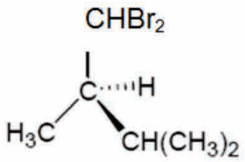


Secuencia en sentido contrario a las agujas del reloj configuración *S*

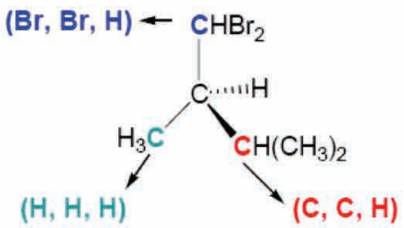


Secuencia en el sentido de las agujas del reloj configuración *R*

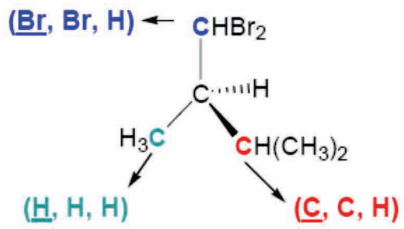
Ejemplo 2. Determinar la configuración *R o S* en estereocentros unidos a más de un átomo igual, como en el compuesto:



1. Se asigna el orden de prioridad de los átomos unidos al carbono estereogénico en base al número atómico que es, en este caso, C, C, C > H. Está claro que el átomo de hidrógeno es el último en prioridad, pero no está claro cuál es la prioridad del grupo CH_3, del grupo $CH(CH_3)_2$ y del grupo $CHBr_2$, puesto que todos estos grupos están unidos al estereocentro por un átomo de carbono.
2. Para establecer la prioridad entre estos tres grupos se procede del siguiente modo: Para cada uno de los átomos de carbono unido directamente al esterocentro se ordenan, de mayor a menor número atómico, los átomos a los que está unido, como se indica en la siguiente figura:

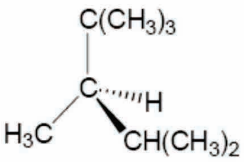


3. A continuación, se establece la prioridad, comparando los tres primeros átomos dentro de cada paréntesis. En el ejemplo que se está considerando estos átomos son Br, C y H, que aparecen subrayados en la siguiente figura:

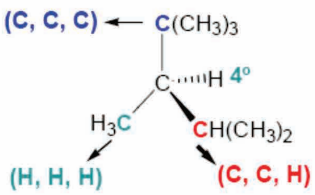


Como el número atómico es Br > C > H esto hace que la prioridad de los grupos sea $CHBr_2$ > $CH(CH_3)_2$ > CH_3. Según esta ordenación la configuración del estereocentro es *R*:

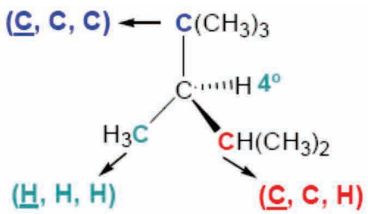
Ejemplo 3. Asignar la configuración R o S en el iguiente compuesto quiral:



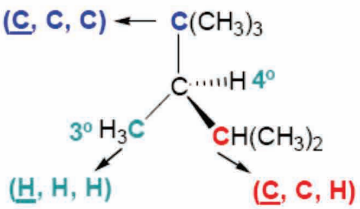
1. Se asigna el orden de prioridad de los átomos unidos al carbono estereogénico, en base al número atómico que es, en este caso, C, C, C > H. Está claro, que el átomo de hidrógeno es el último en prioridad, pero no está claro cual es la prioridad del grupo CH_3, del grupo $CH(CH_3)_2$ y del grupo $C(CH_3)_3$, puesto que todos estos grupos están unidos al estereocentro por un átomo de carbono.
2. Para establecer la prioridad entre estos tres grupos se procede del siguiente modo: Para cada uno de los átomos de carbono unido directamente al esterocentro se ordenan, de mayor a menor número atómico, los átomos a los que está unido, tal como se indica en la siguiente figura:



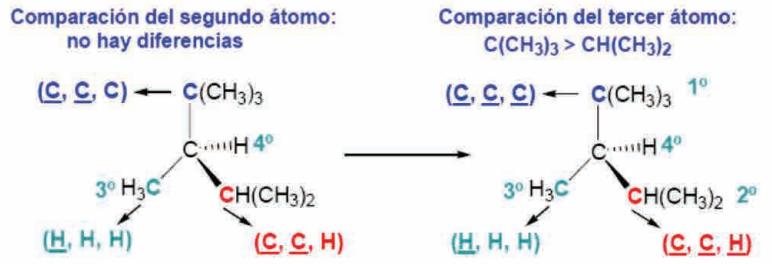
3. A continuación se establece la prioridad comparando los tres primeros átomos dentro de cada paréntesis. En el ejemplo que se está considerando estos átomos son C, C y H, que aparecen subrayados en la siguiente figura:



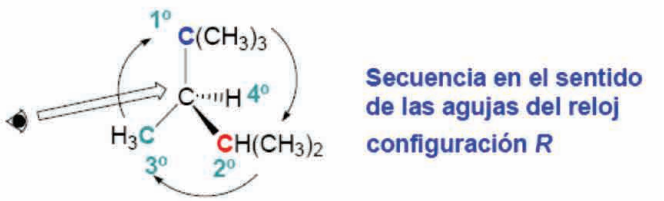
Esta primera comparación permite asignar al grupo CH_3 el número 3 en el orden de prioridad.



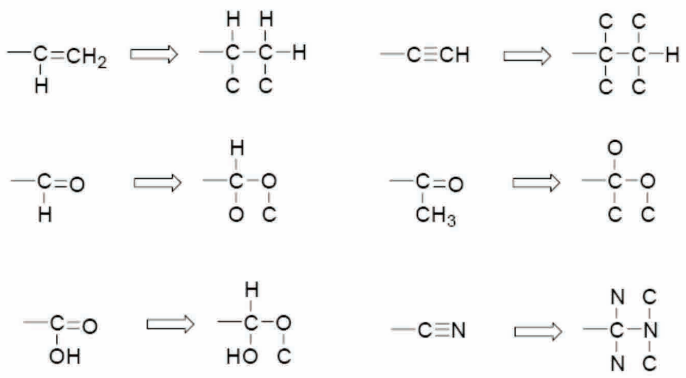
Para diferenciar al grupo $C(CH_3)_3$ del $CH(CH_3)_2$, se compara el segundo átomo dentro del paréntesis de cada grupo. Como este segundo átomo es en ambos casos el C se pasa a comparar el tercer átomo dentro del paréntesis de cada grupo que, en este caso, es C y H, lo que determina que el grupo $C(CH_3)_3$ es prioritario sobre el grupo $CH(CH_3)_3$.



4. Según la ordenación anterior la configuración del estereocentro es *R*:



Para asignar la prioridad de átomos unidos mediante enlaces múltiples se considera que cada enlace π equivale a un enlace simple adicional. Las equivalencias de una serie de grupos que contienen enlaces múltiples se dan en la siguiente figura.

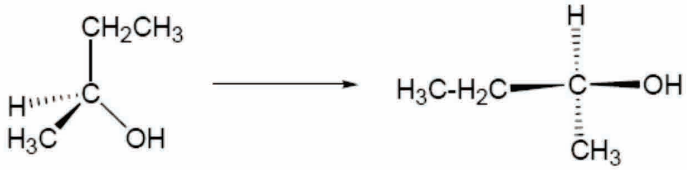


Proyección de Fischer. Configuraciones de los enantiómeros

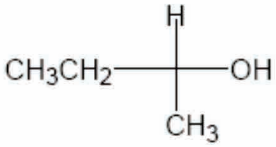
La proyección de Fischer es una forma de representar una molécula tridimensional en una superficie bidimensional. Para transformar la representación tridimensional de una molécula con un estereocentro en una proyección de Fischer se siguen los siguientes pasos:

1. Se orienta la estructura de manera que el carbono del esterocentro quede contenido en el plano del papel; dos de los sustituyentes se dirijen hacia el observador y los otros dos

sustituyentes se alejan del observador:

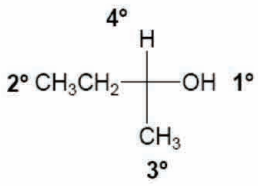


2. Con la orientación correcta se proyectan los dos enlaces que se acercan al observador en la horizontal y los dos enlaces que se alejan, en la vertical:



Para asignar la configuración *R o S* en las proyecciones de Fischer se determina primero el orden de prioridad según la convención Cahn-Ingold-Prelog.

En el caso anterior es:

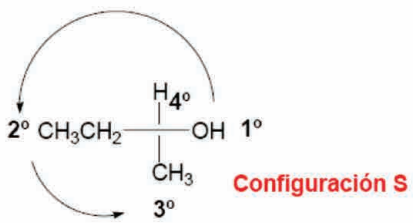


Se unen los tres grupos prioritarios en el orden 1--> 2 --> 3 y se observa si esta unión va en el sentido de reloj o en el sentido contrario.

Si el último grupo en prioridad está en la vertical y la unión 1--> 2-->3 va en sentido R la configuración del estereocentro es R.

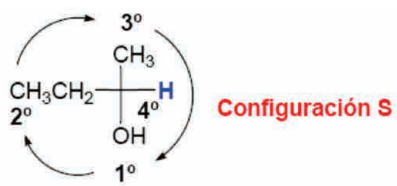
Si el último grupo en prioridad está en la vertical y la unión 1--> 2--> 3 va en sentido S la configuración del estereocentro es S.

Por ejemplo, en la proyección de Fischer anterior la unión 1--> 2--> 3 va en sentido S y como el hidrógeno (último en prioridad) está en la vertical, la configuración correcta del estereocentro es S.



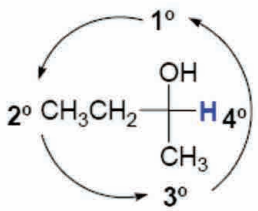
Si el último grupo en prioridad está en la horizontal y la unión 1-->2--> 3 va en sentido R, la configuración del estereocentro es opuesta, o sea, S.

Por ejemplo:



Si el último grupo en prioridad está en la horizontal y la unión 1-->2--> 3 va en sentido S, la configuración del estereocentro es opuesta, o sea, R.

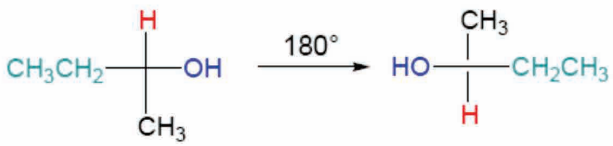
Por ejemplo:



Configuración R

Propiedades de las proyecciones de Fischer

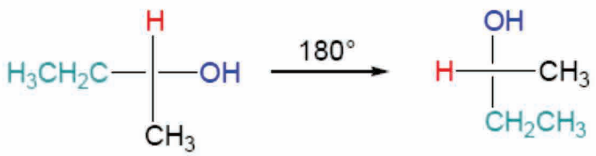
Las proyecciones de Fischer pueden ser movidas 180° en el plano sin que cambie la configuración del estereocentro, por ejemplo:



Configuración S Configuración S

El giro de 180° en el plano de una proyección de Fischer equivale a un número par de intercambios de grupos, lo que permite deducir tal tipo de intercambio deja la configuración del estereocentro inalterada; y, por el contrario, un número impar de intercambios cambia la configuración del estereocentro.

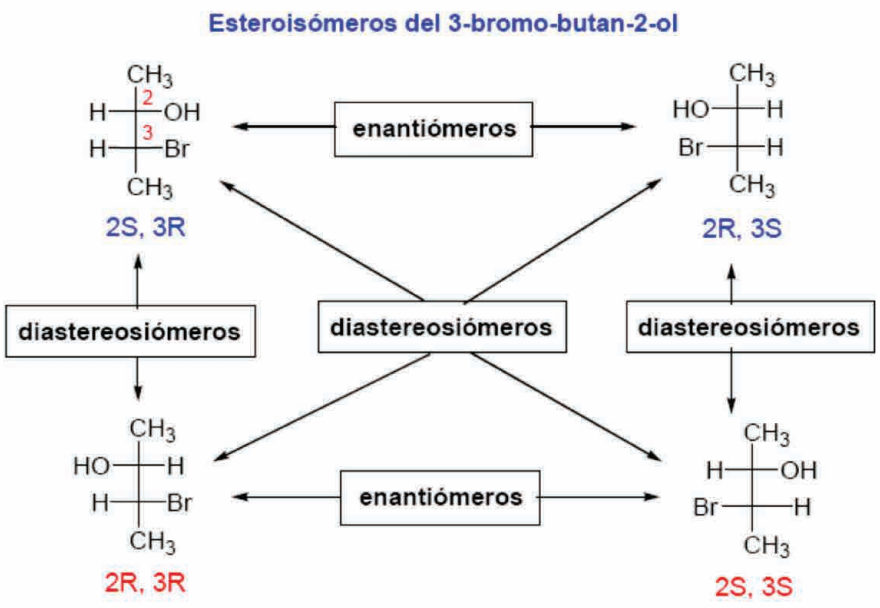
Si una proyección de Fischer se gira 90°, se cambia la configuración del estereocentro, porque tal giro equivale a un número impar de intercambios (tres interconversiones).



Configuración S Configuración R

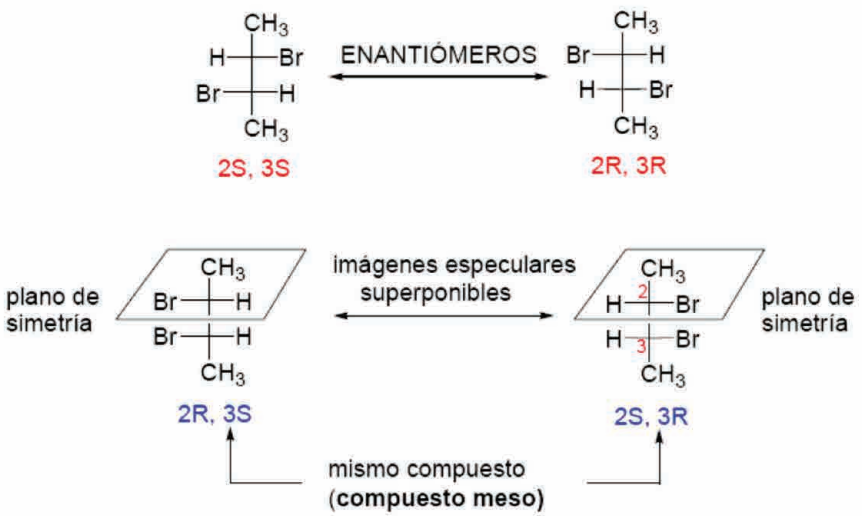
Compuestos con varios carbonos quirales: diastereoisómeros y compuestos meso.

Cuando un compuesto orgánico contiene dos o más centros estereogénicos son posibles 2^n estereoisómeros. A continuación se indican las proyecciones de Fischer de los cuatro posibles estereoisómeros del 3-bromobutan-2-ol y las relaciones de estereoisomería que se establecen entre ellos.



Compuestos meso

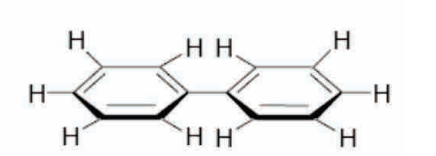
La siguientes formulaciones corresponden a las proyecciones de Fischer de los cuatro posibles estereoisómeros del 2,3-dibromobutano:



Se observa que los estereoisómeros *2R,3S y 2S,3R* presentan un plano de simetría y, aunque aparentan ser imágenes especulares uno del otro, en realidad son el mismo compuesto porque son superponibles. Este tipo de estereoisómeros que carecen de actividad óptica, a pesar de contener en su estructura centros estereogénicos, se denominan compuestos meso.

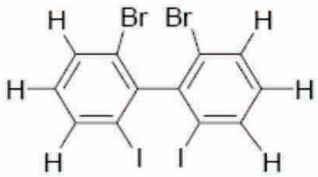
Enantiomerismo conformacional

El bifenilo es un compuesto que no contiene centros estereogénicos y es ópticamente inactivo.



Bifenilo

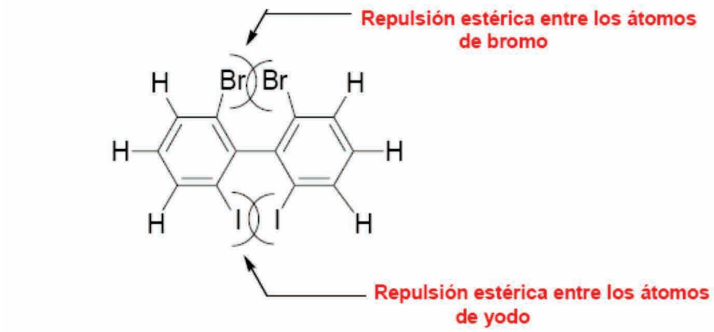
Sin embargo, el 6,6´-dibromo-2,2´-diyodobifenilo, cuya estructura se indica a continuación, existe en dos formas enantioméricas, a pesar de que el compuesto no contiene centros estereogénicos.



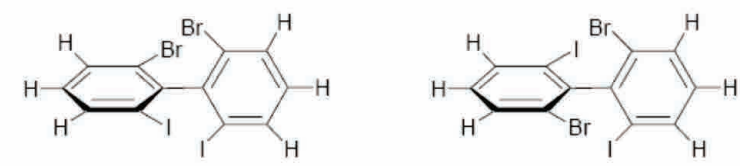
6,6'-Dibromo-2,2'-diyodo-bifenilo

Si la estructura fuese plana, tal como se indica en la figura anterior, habría que concluir que el compuesto sería ópticamente inactivo y, por tanto, incapaz de existir en dos formas enantioméricas. Sin embargo, la conformación plana del 6,6´-dibromo-2,2´-diyododifenilo no puede existir porque colocaría los voluminosos átomos de bromo y de yodo en una situación de alta repulsión estérica.

Para evitar la interacción estérica entre los átomos de halógeno, la molécula adquiere una conformación que coloca a los dos anillos aromáticos en posición perpendicular, con lo que es posible dibujar dos conformaciones alternativas:



Interacciones estéricas en una hipotética conformación plana del 6,6'-dibromo-2,2'-diyodo-bifenilo



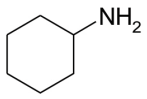
Conformaciones enantioméricas del 6,6'-dibromo-2,2'-diyodo-bifenilo

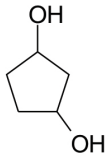
Estas dos conformaciones, que carecen de plano de simetría, son entre sí imágenes especulares no superponibles. Son, por tanto, dos conformaciones enantioméricas.

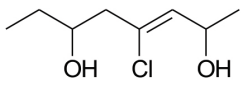
Práctica de aula - isomería óptica

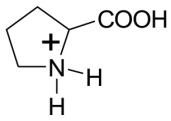
1. Identificar, en los siguientes compuestos, los centros de quiralidad

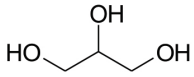
a) $CH_3CH_2CHClCH_2OH$

b) 

c) 

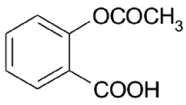
d) 

e) 

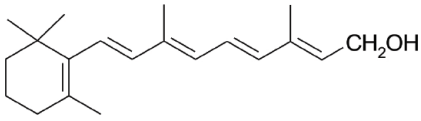
f) 

2. ¿Cuál de los siguientes compuestos son quirales (presentan actividad óptica)?

a) $CH_3CH_2C(CH_3)_2CH(CH_3)CH_2CH_3$

b) 

aspirina

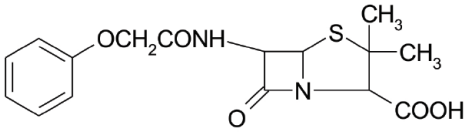
c) 

vitamina A

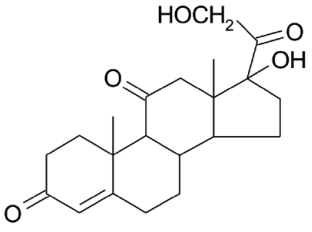
d) $HOCH_2CH(OH)CHO$

gliceraldehído

3. Colocar un asterisco en los carbonos quirales de los siguientes compuestos:



Penicilina V (antibiótico)



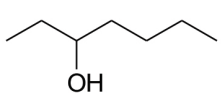
Cortisona (antiinflamatorio)

4. Formular los isómeros ópticos de los siguientes compuestos:

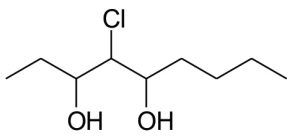
   a. ácido mevalónico
   b. ácido láctico
   c. mentol
   d. 1,4-diclorociclohexano
   e. Treonina

5. Representar los siguientes compuestos en proyección cuña volante y Fischer:

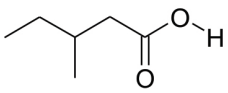
a)



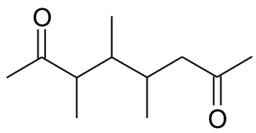
b)



c)

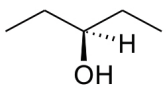


d)

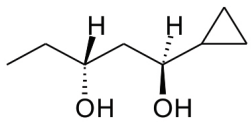


6. Determinar la configuración R- y S- de los siguientes compuestos:

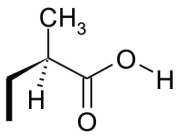
a)



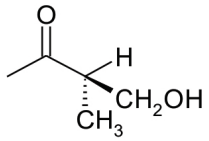
b)



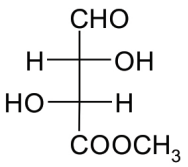
c)



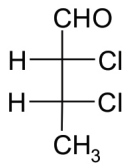
d)



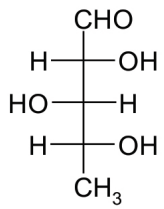
e)



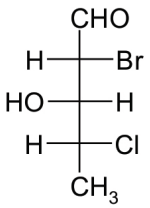
f)



g)

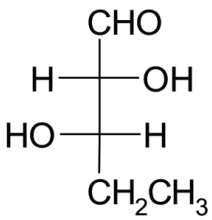


h)

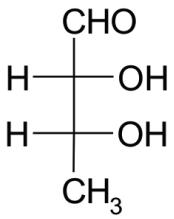


7. Determinar la configuración D- o L- de los siguientes compuestos:

a)

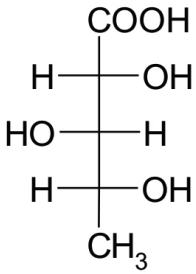


b)

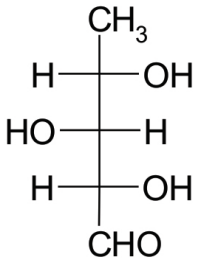


c)

g)

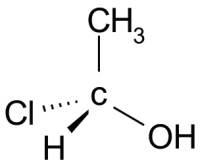


d)

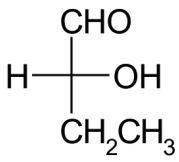


8. Formular el enantiómero de los siguientes compuestos:

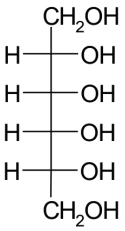
(a)



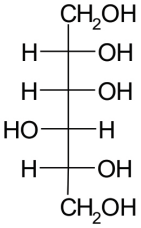
(b)



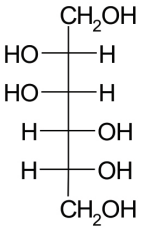
9. Determinar los pares de compuestos que son enantiómeros, diasterómeros, o compuesto meso.



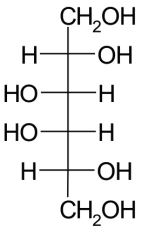
(a)



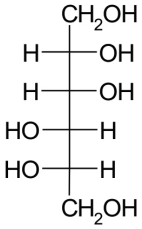
(b)



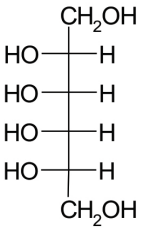
(c)



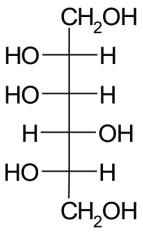
(d)



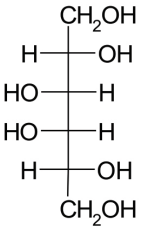
(e)



(f)



(g)



(h)

10. Carbohidratos

10.1 Definición

Son polihidroxialdehídos o polihidroxicetonas o sustancias que por hidrólisis generan los anteriores compuestos.

Los vegetales sintetizan sus carbohidratos mediante el proceso de fotosíntesis.

El hombre usa los carbohidratos de diferentes formas: en su dieta alimenticia (60-65%), muebles (madera), papel (celulosa), vestimenta (algodón, lino y rayón), etc.

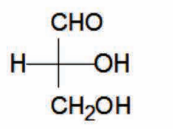
10.2 Clasificación

- Monosacáridos: azúcares simples que no pueden fragmentarse por hidrólisis.
- Disacáridos: producen dos unidades de monosacáridos por hidrólisis.
- Polisacáridos: producen muchas unidades de monosacáridos por hidrólisis.

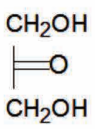
10.3 Monosacáridos

Se clasifican según el grupo funcional en aldosas (-CHO) y cetosas (-CO-). De acuerdo al número de carbonos se clasifican en: triosas, tetrosas, pentosas, hexosas.

Triosas

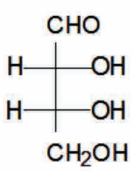


D-Gliceraldehído

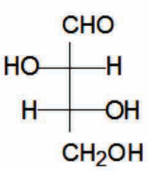


Dihidroxiacetona

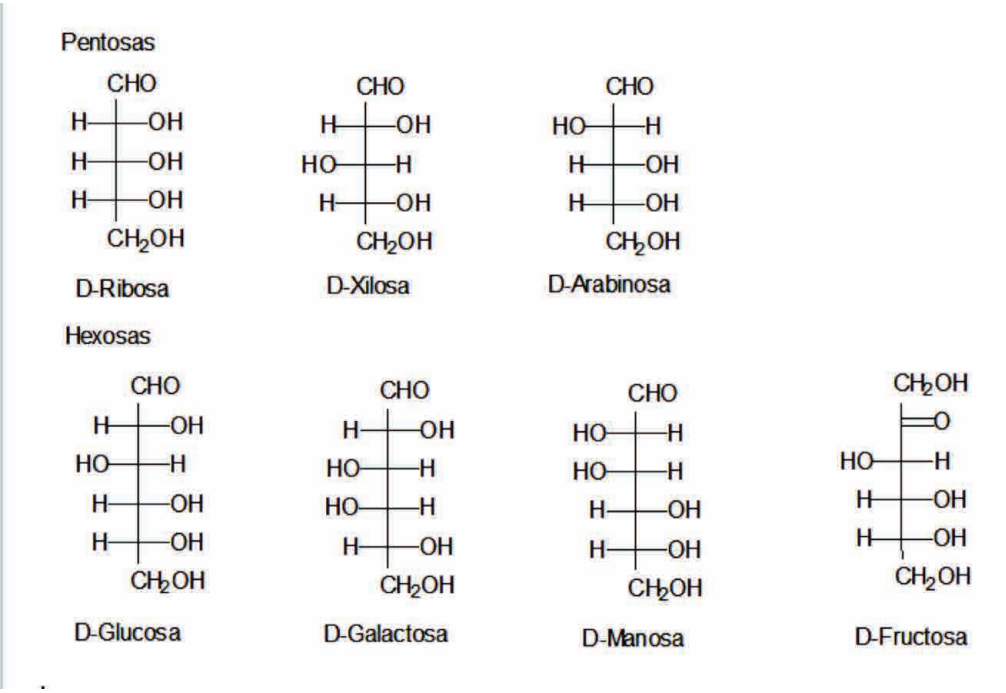
Tetrosas



D-Eritrosa

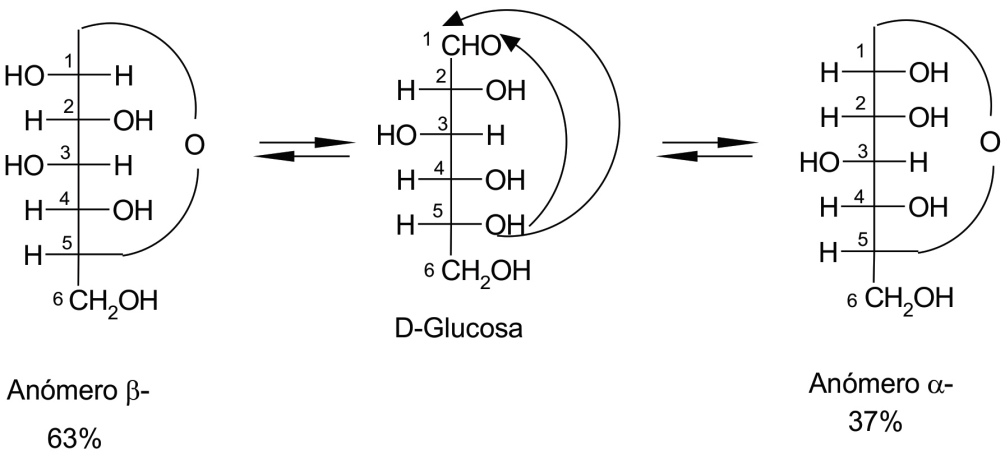


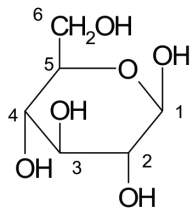
D-Treosa



Epímeros: Son diasterómeros que se diferencian en la configuración de un carbono quiral.

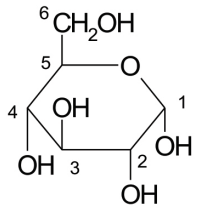
10.4 Ciclación de los monosacáridos



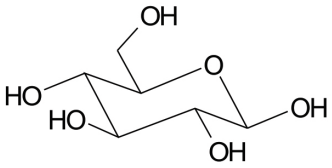


β-D-Glucopiranosa

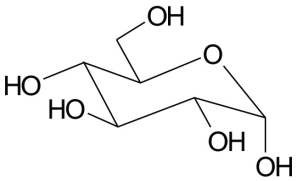
Proyección Haworth



α-D-Glucopiranosa



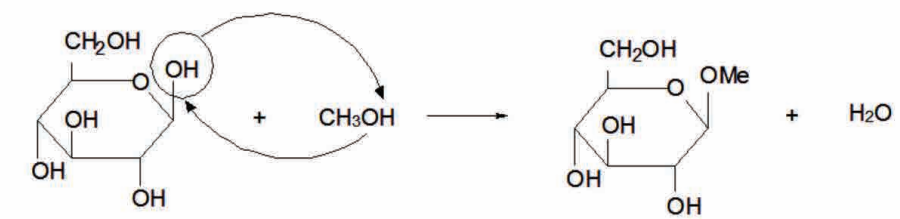
Proyección Conformacional



Las estructuras anoméricas pueden abrirse y cerrarse, hasta obtener el equilibrio entre ambas formas anoméricas y la estructura abierta. Esto permite que existan grupos oxidables –CHO.

10.5 Formación de glicósidos

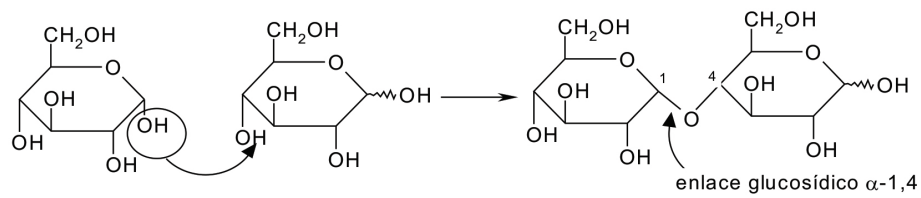
Los anómeros de los monosacáridos pueden reaccionar con otra molécula de alcohol, para formar un glicósido. Esta estructura ya no puede abrirse y no forma grupos oxidables –CHO.



β-D-Glucopiranosa

β-D-Glucopiranósido de metilo

10.6 Principales disacáridos

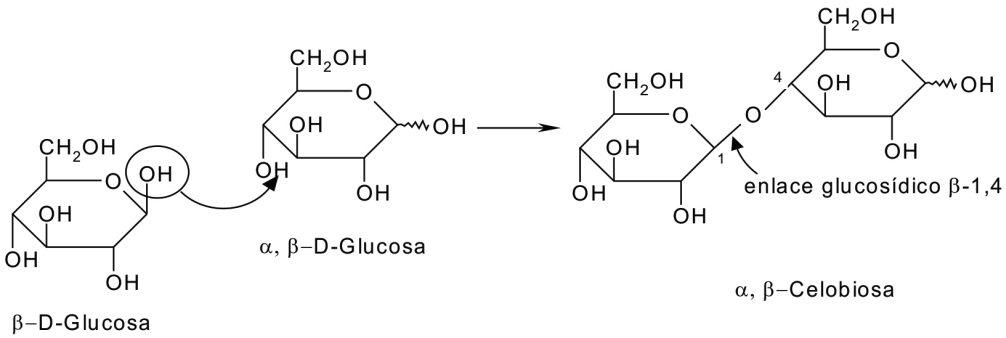


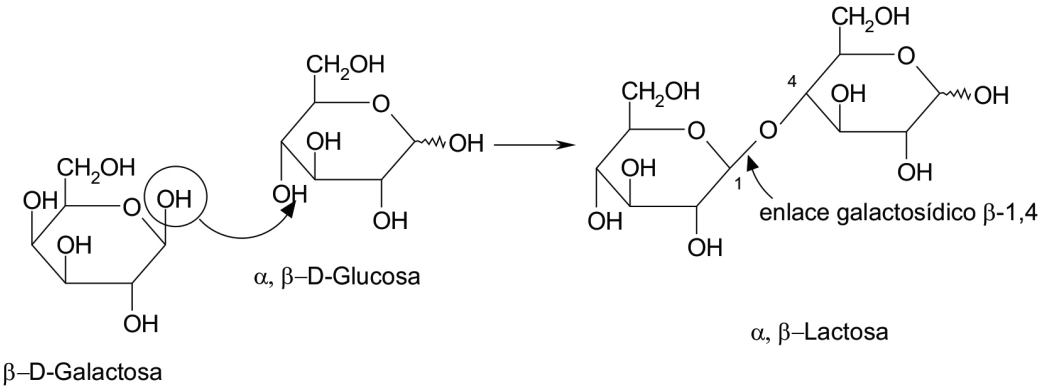
α–D-Glucosa

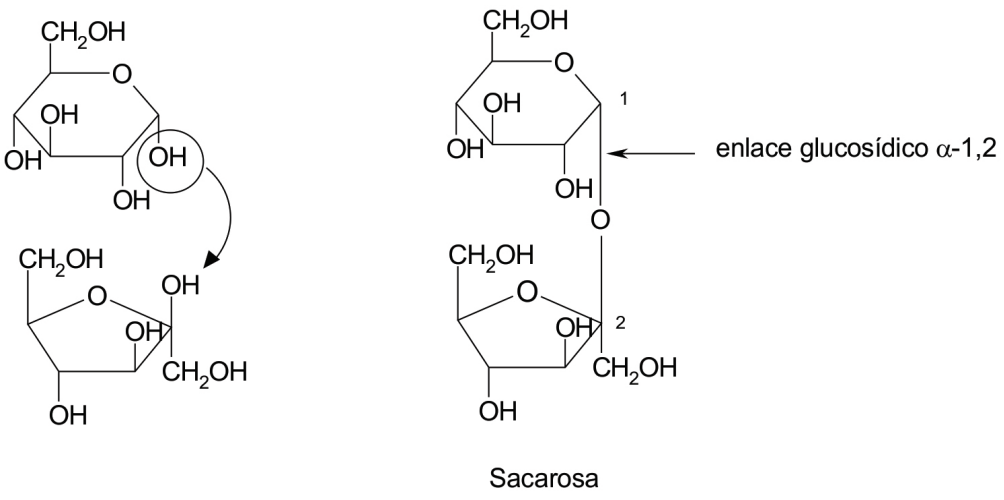
α, β–D-Glucosa

enlace glucosídico α-1,4

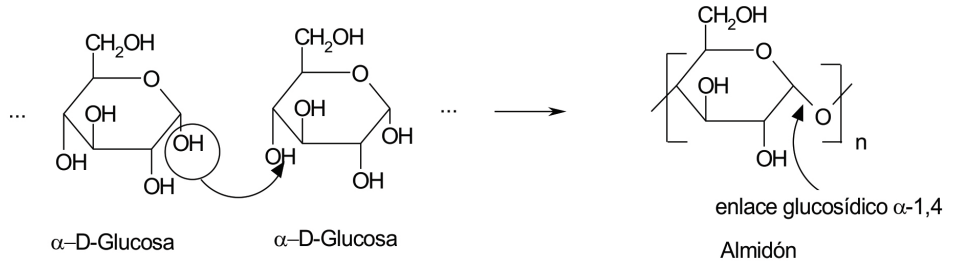
α, β–Maltosa

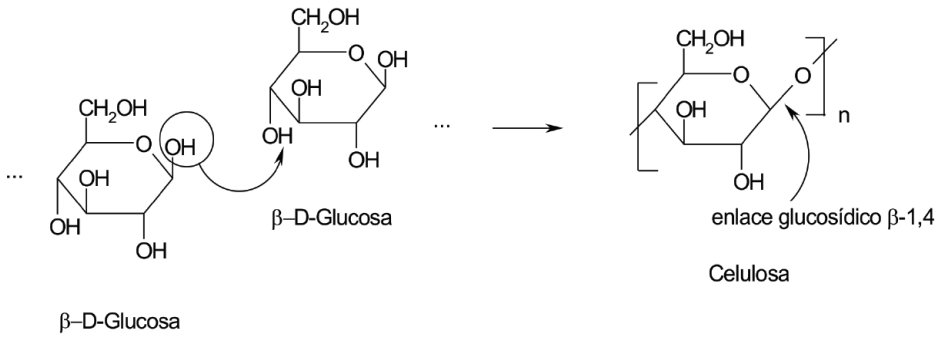

β–D-Glucosa
α, β–D-Glucosa
enlace glucosídico β-1,4
α, β–Celobiosa


β–D-Galactosa
α, β–D-Glucosa
enlace galactosídico β-1,4
α, β–Lactosa


enlace glucosídico α-1,2
Sacarosa

10.7 Principales polisacáridos





10.8 Reacciones químicas

a. ***Prueba de Fehling, $Cu^{2}+$/OH-, y Tollen's, $Ag(NH_3)_2+$***

Una prueba positiva con estos reactivos, identifica azúcares reductores. No distingue una aldosa de una cetosa.

Aldosa o cetosa + R. de Fehling → ion aldonato

b. ***Reacción con Br_2, H_2O***

Aldosa + Br_2, H_2O → ácido aldónico

c. ***Reacción con HNO_3***

Aldosa + HNO_3 → ácido aldárico

d. ***Reacción de reducción***

Aldosa + H_2 /cat. → alditol

Los carbohidratos sin centros anoméricos libres no dan prueba positiva con ninguna de las reacciones anteriores.

Práctica de aula - carbohidratos

1. Definir los siguientes términos:

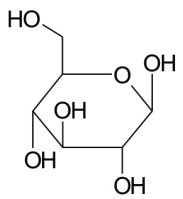
a. Carbohidrato
b. Enlace glicosídico
c. Almidón
d. Mutarrotación
e. Glicósido
f. Anómero
g. Azúcar reductor
h. Epímero

2. Formular las estructuras anoméricas de los siguientes carbohidratos, en proyección Fischer y Haworth:

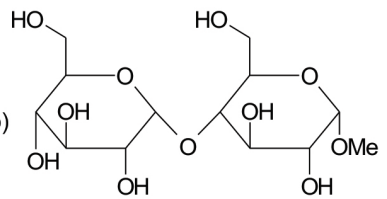
a. D-ribosa (furanosa)
b. D-xilosa (furanosa)
c. D-galactosa (piranosa)
d. D-manosa (piranosa)

3. Identificar las formas anoméricas y glicosídicas en las siguientes estructuras:

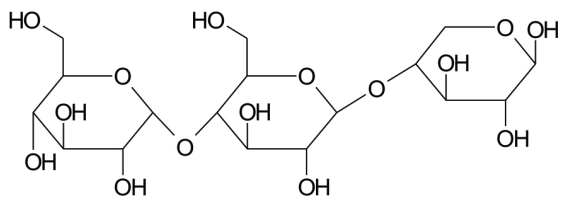
a)



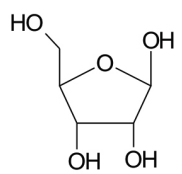
b)



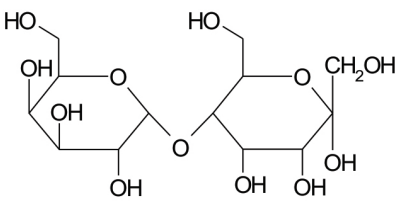
c)



d

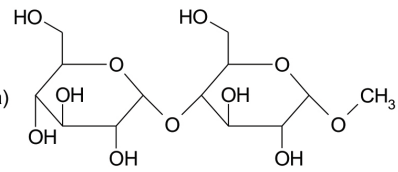


e)

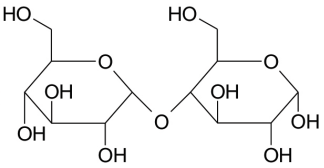


4. En los siguientes compuestos, determinar en base a su estructura que azúcares son reductores.

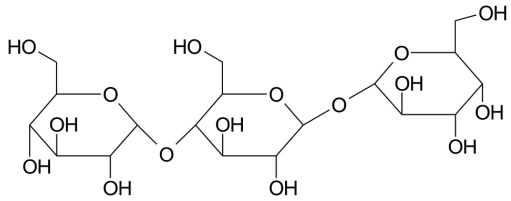
a)



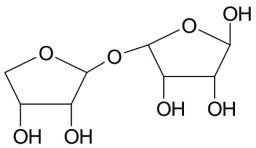
b)



c)

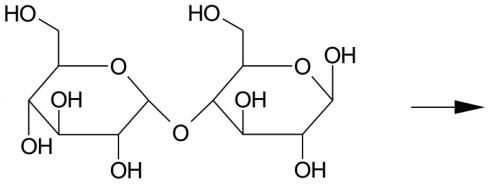


d)

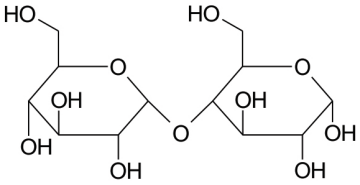


5. En las siguientes estructuras anoméricas, aperturar la estructura donde corresponda:

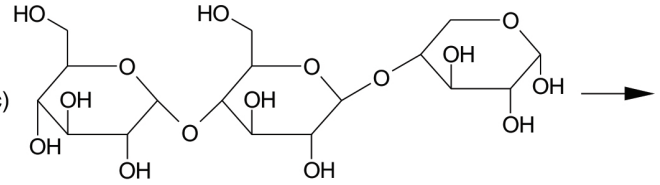
a)



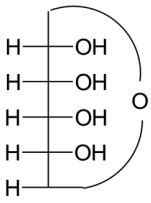
b)



c)

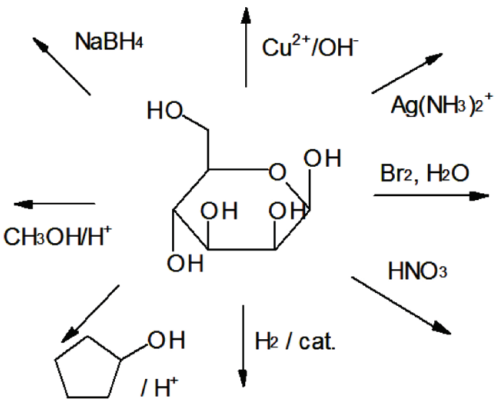


d)

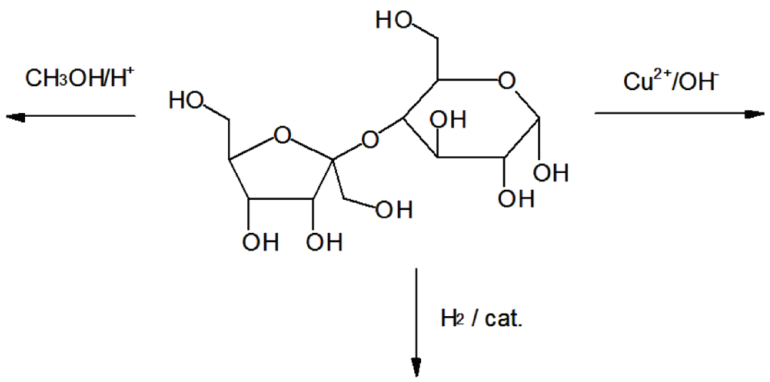


6. Completar las siguientes reacciones químicas:

a)



b)



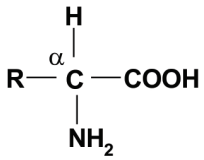
11. Proteínas

11.1 Definición

Las proteínas son biopolímeros (macromoléculas orgánicas) de elevado peso molecular, constituidas básicamente por carbono, hidrógeno, oxígeno y nitrógeno; aunque pueden contener también azufre y fósforo y, en menor proporción, hierro, cobre, magnesio, yodo, etc. Se consideran también como biopolímeros de aminoácidos y su presencia en los seres vivos es indispensable para el desarrollo de los múltiples procesos vitales.

11.2 Los aminoácidos

Son las unidades básicas que forman las proteínas. Su denominación responde a la composición química general que presentan, en la que un grupo amino ($-NH_2$) se une al α-C de un ácido carboxílico (-COOH). Las otras dos valencias de ese carbono quedan saturadas con un átomo de hidrógeno (-H) y con un grupo químico variable al que se denomina *cadena lateral* (-R).

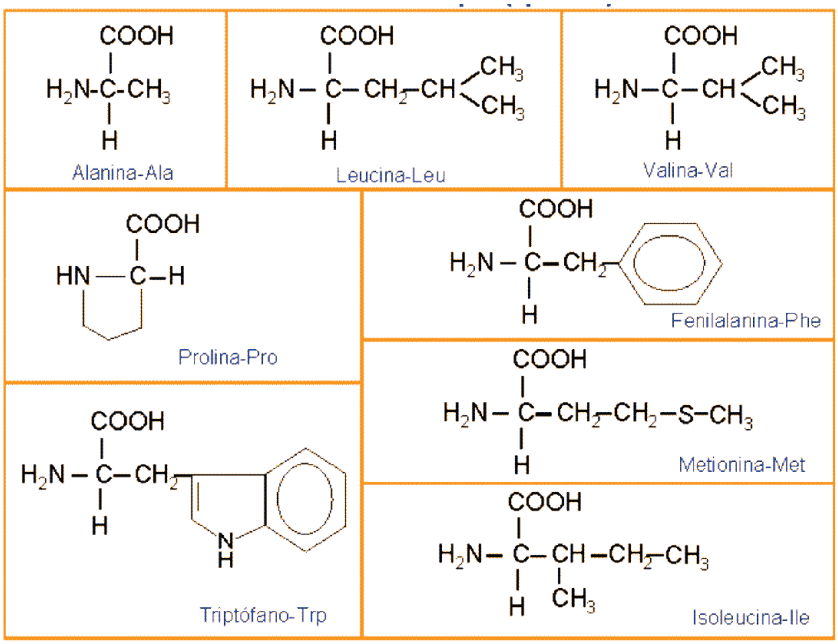


En las proteínas, sólo se encuentran aminoácidos de configuración L- (con excepción de la glicina).En la naturaleza existen unos 80 aminoácidos diferentes, pero de todos ellos sólo 20 forman las proteínas.

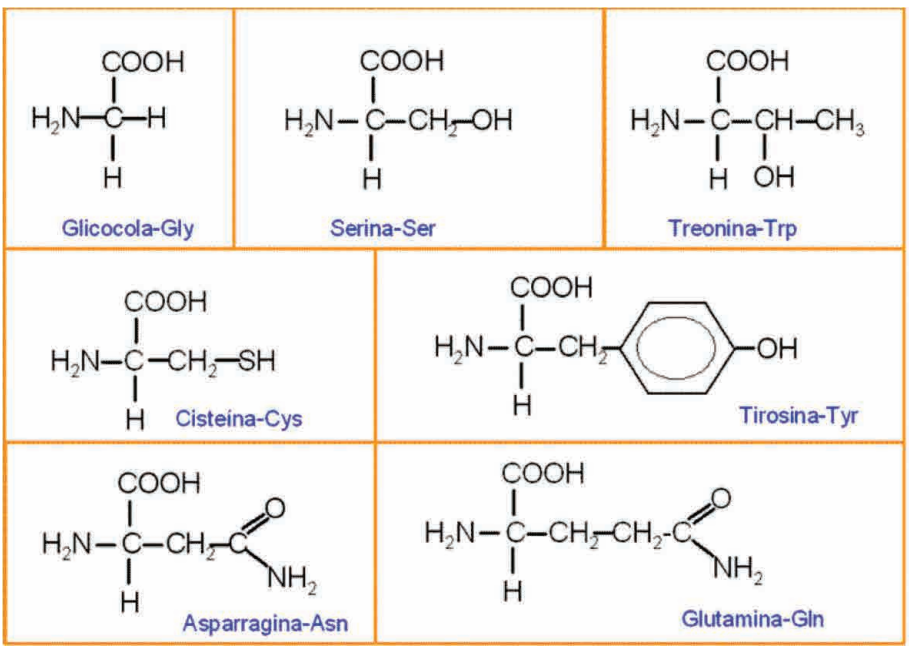
Los aminoácidos que un organismo no puede sintetizar y, por tanto, tienen que ser suministrados con la dieta, se denominan aminoácidos esenciales. Para la especie humana son esenciales: treonina, metionina, lisina, valina, triptófano, leucina, isoleucina y fenilalanina (además, puede añadirse la histidina como esencial durante el crecimiento, pero no para el adulto).

Los aminoácidos se clasifican de acuerdo a su cadena lateral en:

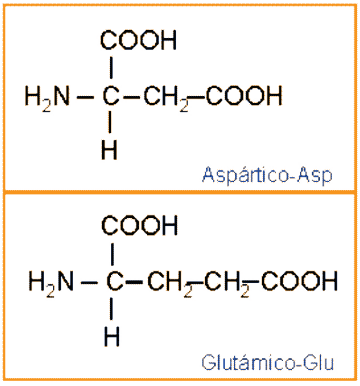
Aminoácidos del grupo I (apolares)



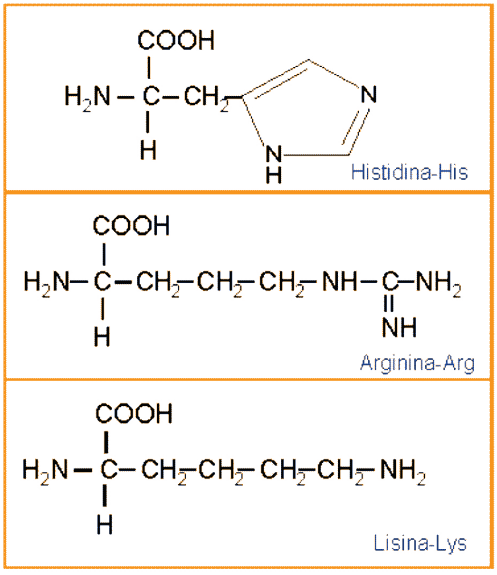
Aminoácidos del grupo II (polares no ionizables)



Aminoácidos del grupo III
(polares ionizables ácidos)



Aminoácidos del grupo IV
(polares ionizables básicos)



11.3 Propiedades de los aminoácidos

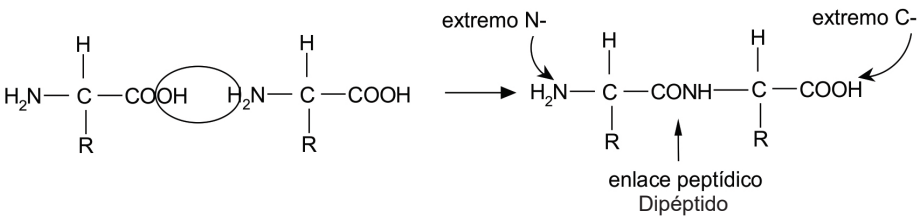
Los aminoácidos son compuestos sólidos, incoloros, cristalizables, de elevado punto de fusión (habitualmente por encima de los 200 ºC), solubles en agua, con actividad óptica y comportamiento anfótero.

El comportamiento anfótero se refiere a que, en disolución acuosa, los aminoácidos se ionizan dependiendo del pH, como un ácido (cuando el pH es básico), como una base (cuando el pH es ácido), o como un ácido y una base a la vez (cuando el pH es neutro). En este último caso, adoptan un estado dipolar iónico conocido como zwitterión.

El pH en el cual un aminoácido tiende a adoptar una forma dipolar neutra (igual número de cargas positivas que negativas) se denomina punto isoeléctrico. La solubilidad en agua de un aminoácido es mínima en su punto isoeléctrico.

11.4 Péptidos

Son cadenas lineales de aminoácidos enlazados por enlaces químicos de tipo amídico a los que se denominan enlace peptídico.



Para formar péptidos, los aminoácidos se enlazan entre sí para formar cadenas de longitud y secuencia variables. Para denominar a estas cadenas se utilizan prefijos convencionales como:

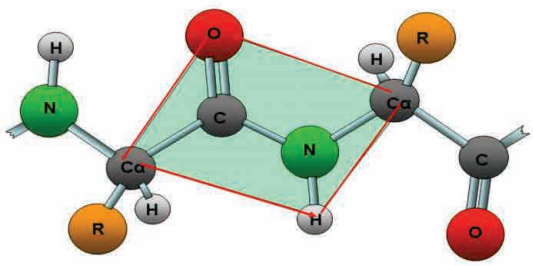
Oligopéptidos
Si el número de aminoácidos es menor 10.

- Dipéptidos, si el número de aminoácidos es 2.
- Tripéptidos, si el número de aminoácidos es 3.
- Tetrapéptidos, si el número de aminoácidos es 4, y así, sucesivamente.

Polipéptidos o cadenas polipeptídicas

Si el nùmero de aminoácidos es mayor de10. Cada péptido o polipéptido se suele escribir, convencionalmente, de izquierda a derecha, empezando por el extremo N-terminal, que corresponde a un grupo amino libre, y se finaliza por el extremo C-terminal, que corresponde a un grupo carboxilo libre. Lo que diferencia a los péptidos y, por extensión, las proteínas, es el número, la naturaleza y el orden o secuencia de sus aminoácidos.

El carácter parcial de doble enlace del enlace peptídico (-C=N-) determina su disposición espacial en un plano, con distancias y ángulos fijos. Como consecuencia, el enlace peptídico presenta cierta rigidez e inmoviliza en el plano a los átomos que lo forman.



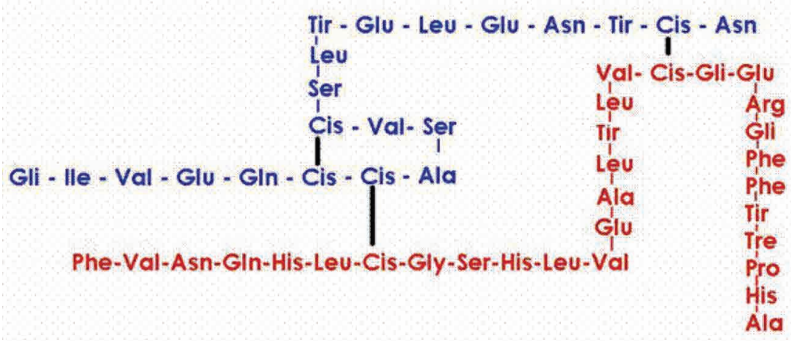
Los átomos unidos al carbono y al nitrógeno que forman el enlace peptídico están todos en un mismo plano

11.5 Estructura de las proteínas

La estructura tridimensional de una proteína es un factor determinante en su actividad biológica.

Estructura primaria

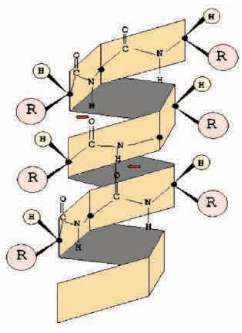
Está representada por la sucesión lineal de aminoácidos que forman la cadena peptídica y, por lo tanto, indica qué aminoácidos componen la cadena y el orden en que se encuentran. El ordenamiento de los aminoácidos en cada cadena pepídica no es arbitrario, sino que obedece a un plan predeterminado en el ADN. Esta estructura define la especificidad de cada proteína.



Estructura primaria de la insulina humana

Estructura secundaria

Es la disposición espacial que adopta la cadena peptídica (estructura primaria) a medida que se sintetiza en los ribosomas. Se debe a los giros y plegamientos que sufre como consecuencia de la capacidad de rotación del carbono α y de la formación de enlaces débiles (puentes de hidrógeno). Las formas que pueden adoptar son: α-hélice (3.6 aminoácidos por vuelta) y lámina -plegada.



α-Hélice

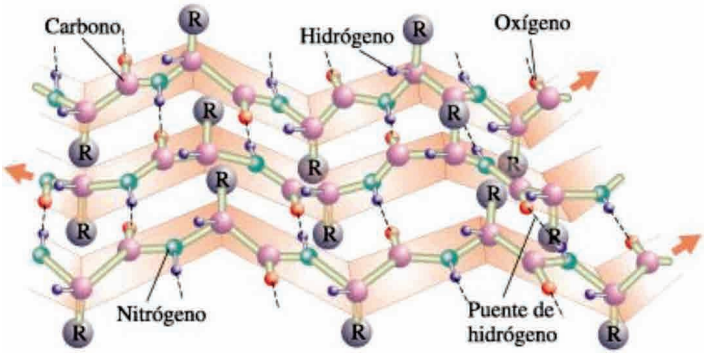
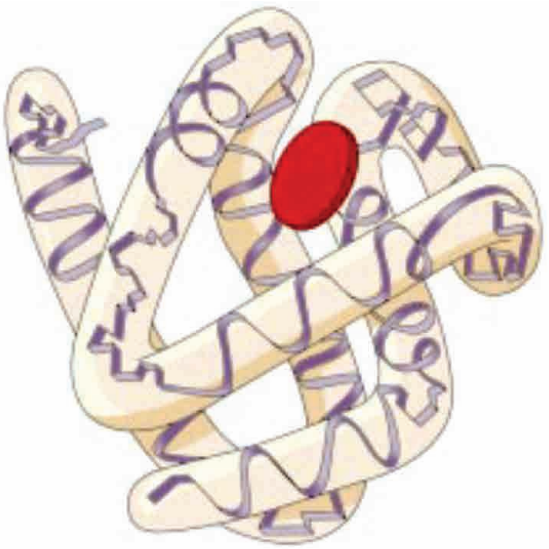


Lámina β-plegada

Estructura terciaria

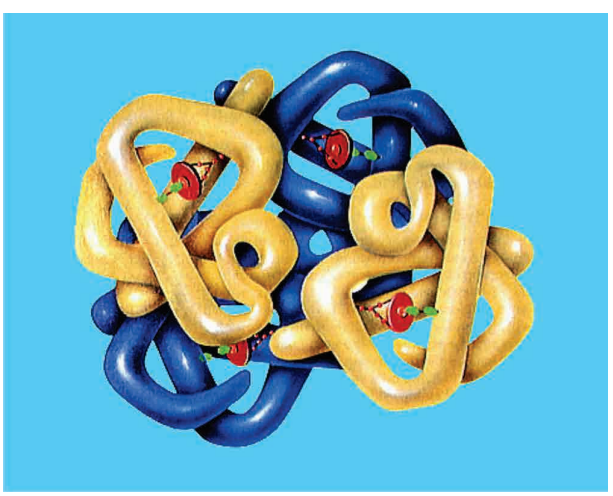
Está representada por los superplegamientos y enrrollamientos de la estructura secundaria, constituyendo formas tridimensionales geométricas muy complicadas que se mantienen por enlaces fuertes (puentes disulfuro entre dos cisteinas) y otros débiles (puentes de hidrógeno, fuerzas de Van der Waals, interacciones iónicas e interacciones hidrofóbicas). Desde el punto de vista funcional, esta estructura es la más importante, por cuanto al alcanzarla la mayoría de las proteínas adquieren su actividad biológica o funcional.



Estructura terciaria de la mioglobina

Estructura cuaternaria

Está representada por el acoplamiento de varias cadenas polipeptídicas, iguales o diferentes, con estructuras terciarias (protómeros) que quedan autoensambladas por enlaces débiles, no covalentes. Esta estructura no la poseen, todas las proteínas, pero sí la hemoglobina y las enzimas alostéricas.



Estructura cuaternaria de la hemoglobina

11.6 Propiedades de las proteínas

Solubilidad

Las proteínas son solubles en agua cuando adoptan una conformación globular. La solubilidad se debe a los radicales (-R) libres de los aminoácidos que, al ionizarse, establecen enlaces débiles (puentes de hidrógeno) con las moléculas de agua. Así, cuando una proteína se solubiliza queda recubierta de una capa de moléculas de agua (capa de solvatación) que impide que se pueda unir a otras proteínas, lo cual provocaría su precipitación (insolubilización). Esta propiedad es la que hace posible la hidratación de los tejidos de los seres vivos.

Capacidad amortiguadora

Las proteínas tienen un comportamiento anfótero, y con lo que pueden neutralizar las variaciones de pH del medio, ya que se comportan como un ácido o una base y, por tanto, liberar o retirar protones (H^+) del medio en el que se encuentran.

Desnaturalización y renaturalización

La desnaturalización de una proteína se refiere a la ruptura de los enlaces que mantenían sus estructuras cuaternaria, terciaria y secundaria, conservándose solamente la primaria. En estos casos las proteínas se transforman en filamentos lineales y delgados que se entrelazan hasta formar compuestos fibrosos e insolubles en agua. Los agentes que pueden desnaturalizar a una proteína pueden ser: calor excesivo, sustancias que modifican el pH, alteraciones en la concentración, alta salinidad, agitación molecular, etc. El efecto visible de este fenómeno es que las proteínas se hacen menos solubles y pierden su actividad biológica. La desnaturalización puede ser reversible (renaturalización), pero en muchos casos es irreversible.

Especificidad

Es una de las propiedades más característica, y se refiere a que cada ser vivo es capaz de fabricar sus propias proteínas (diferentes de las de otras especies) y, aún, dentro de una misma especie hay diferencias proteicas entre los distintos individuos. Esto no ocurre con los glúcidos y lípidos, que son comunes a todos los seres vivos.

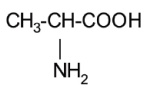
Práctica de aula - aminoácidos, péptidos y proteínas

1. Definir, explicar y proponer ejemplo de los siguientes términos:

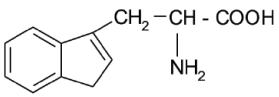
a. α-aminoácido
b. polipéptido
c. proteína
d. enlace peptídico
e. grupo prostético
f. proteína simple
g. proteína conjugada
h. desnaturalización
i. punto isoeléctrico
j. zwitterión

2. Escribir las fórmulas y los nombres de dos miembros representativos de cada una de las tres clases de aminoácidos.
3. Las proteínas ayudan a mantener el pH del organismo. Explicar la forma en que desempeñan esta función.

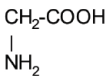
4. Formular el tetrapéptido: Gli-Ala-Trp-Asp



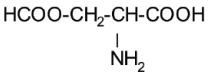
(Ala)



(Trp)

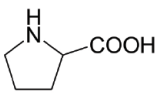


(Gli)

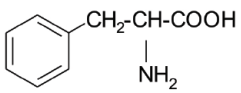


(Asp)

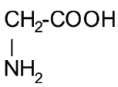
5. Formular el pentapéptido: Fen-Pro-Cis-Gli-Pro



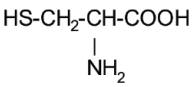
(Pro)



(Fen)



(Gli)



(Cis)

6. Identifique en el siguiente cuadro la forma iónica (catión, anión o neutro) de los diferentes aminoácidos a los valores de pH indicados.

Aminoácido	Punto isoeléctrico	pH = 2	pH = 5,6	pH = 11
Valina	6,0			
Treonina	5,6			
Arginina	10,8			
Acido glutámico	3,2			
Lisina	9,7			

7. Identifique los aminoácidos que tienden a modificar la estructura proteica espiral, porque no cumplen con el requisito de formación de enlaces de hidrógeno. ¿Cuáles son? (Nota: la estructura espiral que adopta la molécula de proteína es una consecuencia de los enlaces

por puente de hidrógeno entre uniones peptídicas de cada cuatro aminoácidos).

8. La hidrólisis total de un fragmento octapéptido de una proteína hipotética produjo una molécula de: alanina (Ala), ácido glutámico (Glu), glicina (Gli), leucina (Leu), metionina (Met), valina (Val); y dos moléculas de cisteina (Cis). De la hidrólisis parcial, se aislaron los fragmentos: Gli-Cis, Leu-Val-Gli, Cis-Glu, Cis-Ala, Cis-Glu-Met y Met-Cis. Deduzca la secuencia de los aminoácidos en el octapéptido.

9. Cada molécula de hemoglobina contiene cuatro átomos de hierro. El porcentaje de hierro en la molécula es aproximadamente de 0,34%. ¿Cuál es el peso molecular aproximado de la hemoglobina?

10. Formular y nombrar los aminoácidos esenciales.

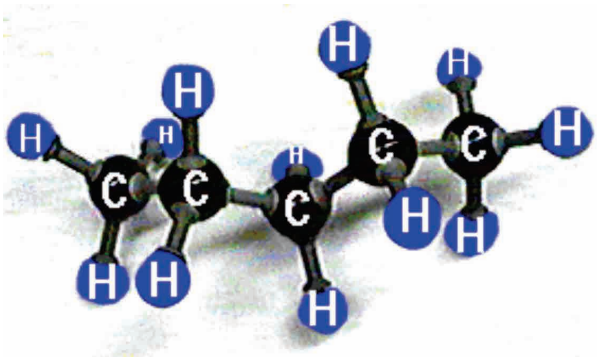
12 Lípidos

12.1 Definición

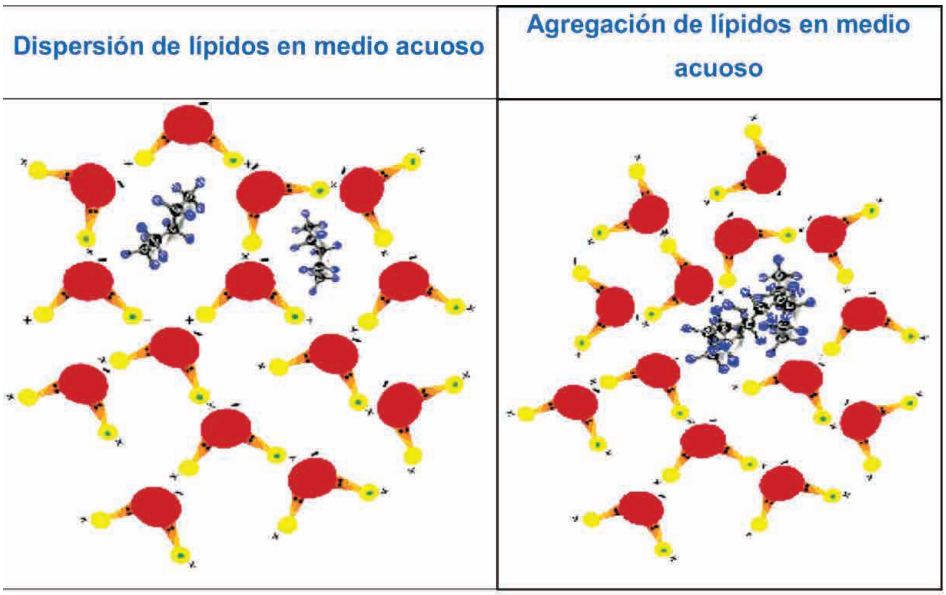
Los lípidos son biomoléculas orgánicas formadas básicamente por carbono e hidrógeno y, generalmente, también oxígeno, pero en porcentaje mucho más bajo. Además, también pueden contener fósforo, nitrógeno y azufre.

Es un grupo de sustancias heterogéneas insolubles en agua, pero solubles en disolventes orgánicos como el éter, cloroformo, benceno y metanol.

Una característica básica de los lípidos, y de la que derivan sus principales propiedades biológicas, es la hidrofobicidad. La baja solubilidad de los lipídos se debe a que su estructura química es fundamentalmente hidrocarbonada (alifática, alicíclica o aromática), con gran cantidad de enlaces C-H y C-C.



La naturaleza de los mencionados enlaces es 100% covalente y su momento dipolar es mínimo. El agua es una molécula muy polar con facilidad para formar puentes de hidrógeno, por lo que no es capaz de interaccionar con estas moléculas. En presencia de moléculas lipídicas, el agua adopta en torno a ellas una estructura ordenada que maximiza las interacciones entre las propias moléculas de agua, forzando a la molécula hidrofóbica al interior de una estructura en forma de jaula, que también reduce la movilidad del lípido. Todo ello supone una configuración de baja entropía, que resulta energéticamente desfavorable. Esta disminución de entropía es mínima si las moléculas lipídicas se agregan entre sí e interaccionan mediante fuerzas de corto alcance, como las fuerzas de Van der Waals. Este fenómeno recibe el nombre de efecto hidrofóbico.



Los lípidos son constituyentes importantes de la alimentación (aceites, manteca, yema de huevo), representan una importante fuente de almacenamiento de energía y funcionan como: aislantes térmicos, componentes estructurales de membranas biológicas, precursores de hormonas (sexuales, corticales), ácidos biliares, vitaminas y otras.

12.2 Funciones

Los lípidos desempeñan cuatro funciones:

1. Función de reserva. Son la principal reserva energética del organismo. Un gramo de grasa produce 9,4 kcal en las reacciones metabólicas de oxidación, en tanto que proteínas y glúcidos sólo producen 4,1 kcal/g
2. Función estructural. Forman las bicapas lipídicas de las membranas. Recubren órganos y le dan consistencia, o protegen mecánicamente como el tejido adiposo de pies y manos.
3. Función biocatalizadora. Los lípidos favorecen o facilitan las reacciones químicas que se producen en los seres vivos; en esta función participan las vitaminas lipídicas, las hormonas esteroideas y las prostaglandinas.
4. Función transportadora. El transporte de lípidos desde el intestino hasta su lugar de destino se realiza mediante su emulsión gracias a los ácidos biliares y a los proteolípidos.

12.3 Clasificación

Los lípidos se clasifican en dos grupos, atendiendo a que posean en su composición ácidos grasos (lípidos saponificables) o no lo posean (lípidos insaponificables).

1. Lípidos saponificables

A. Simples
   - Acilglicéridos
   - Céridos

B. Complejos
   - Fosfolípidos
   - Glucolípidos

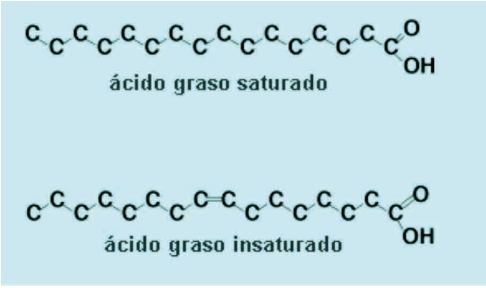
2. Lípidos insaponificables
   A. Terpenos
   B. Esteroides
   C. Prostaglandinas

12.4 Ácidos grasos

Los ácidos grasos son moléculas formadas por una larga cadena hidrocarbonada de tipo lineal, con un número par de átomos de carbono; tienen en un extremo de la cadena un grupo carboxilo (-COOH).

Se conocen unos 70 ácidos grasos que se pueden clasificar en dos grupos:

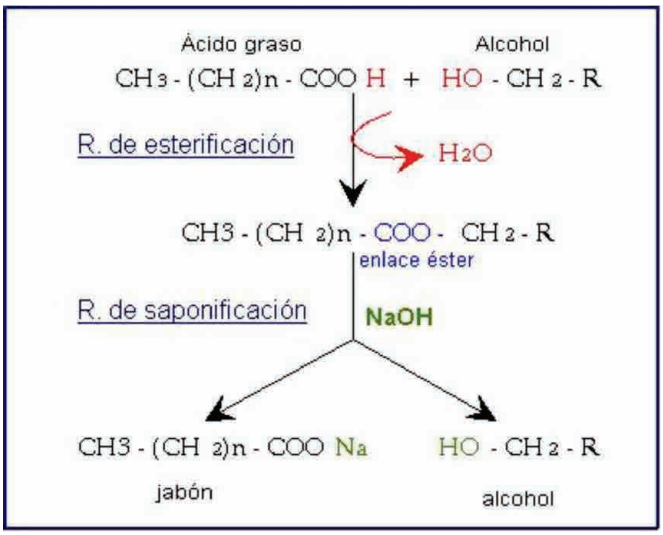
1. Ácidos grasos saturados; sólo tienen enlaces simples entre los átomos de carbono; por ejemplo, el ácido mirístico (14C); palmítico (16C) y esteárico (18C).
2. Ácidos grasos insaturados; tienen uno o varios *enlaces dobles* en su cadena y sus moléculas generando cambios de dirección en los lugares dónde aparece un doble enlace; por ejemplo, el oléico (18C, un doble enlace) el linoleíco (18C y dos dobles enlaces).y el linolénico (18 carbonos y tres dobles enlaces).



Propiedades de los ácidos grasos

- Solubilidad. Los ácidos grasos poseen una zona hidrófila, el grupo carboxilo (-COOH), y una zona hidrófoba, la cadena hidrocarbonada con grupos metileno ($-CH_2-$) y el grupo metilo ($-CH_3$) terminales.
- Por eso, las moléculas de los ácidos grasos son *anfipáticas*, pues por una parte, la cadena alifática es apolar y, por tanto, soluble en disolventes orgánicos (hidrófobo), y por otra, el grupo carboxilo es *polar* y soluble en agua (hidrófilo).
- Desde el punto de vista químico, los ácidos grasos son capaces de formar enlaces éster con los grupos hidroxilos de otras moléculas.

Cuando estos enlaces se *hidrolizan* con un *álcali* se rompen y se obtienen las sales de los ácidos grasos correspondientes, denominados jabones, proceso denominado saponificación.

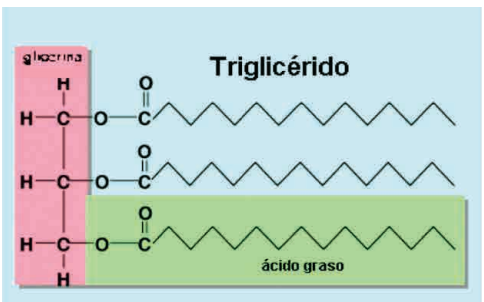


12.5 Lípidos simples

Son lípidos saponificables en cuya composición química sólo intervienen carbono, hidrógeno y oxígeno.

Triglicéridos

Son lípidos simples formados por la esterificación de una, dos o tres moléculas de ácidos grasos con una molécula de glicerina. También reciben el nombre de glicéridos o grasas simples.



Según el número de ácidos grasos, se distinguen tres tipos de estos lípidos:

- Simples, que contienen iguales moléculas de ácidos grasos.
- Mixtos, con dos o más moléculas de ácidos grasos diferentes.

Los acilglicéridos frente a bases dan lugar a reacciones de saponificación en la que se producen moléculas de jabón.

Propiedades químicas de los lípidos simples

Número o índice de yodo. Se define como el número de gramos de yodo que reaccionan con 100 gramos de grasa o aceite. Su valor determina el grado de instauración de un lípido. El índice de yodo de las grasas, por lo general es menor que 70; en tanto que, el de los aceites es mayor que 70.

Hidrogenación. Los aceites se puede convertir en grasas por hidrogenación, debido a que el hidrógeno se adiciona a los dobles enlaces presentes en los aceites. La margarina es una mezcla de aceites insaturados e hidrogenados, saborizantes, agentes colorantes y vitaminas A y D.

Hidrólisis. En medio ácido forma ácidos grasos y glicerol y en medio básico forma sales de ácido graso (jabón) y glicerol.

Formación de acroleína. Este compuesto se forma a partir del glicerol, generado por hidrólisis de un aceite o grasa a altas temperaturas. Son vapores irritantes de la nariz y ojos y de olor desagradable.

Rancidez. Se genera por hidrólisis y oxidación, formando ácidos grasos y aldehídos de bajo peso molecular, tales como el ácido butírico.

Ceras

Las ceras son ésteres de ácidos grasos de cadena larga con alcoholes también de cadena larga. En general, son sólidas e insolubles en agua. Todas sus funciones están relacionadas con su *impermeabilidad al agua* y con su *consistencia firme*. Así, las plumas, el pelo, la piel, las hojas, frutos, están cubiertas de una capa cérea protectora.

Una de las ceras más conocidas es la que segregan las abejas para confeccionar su panal (palmitato de miricilo, $C_{30}H_{61}OH$).

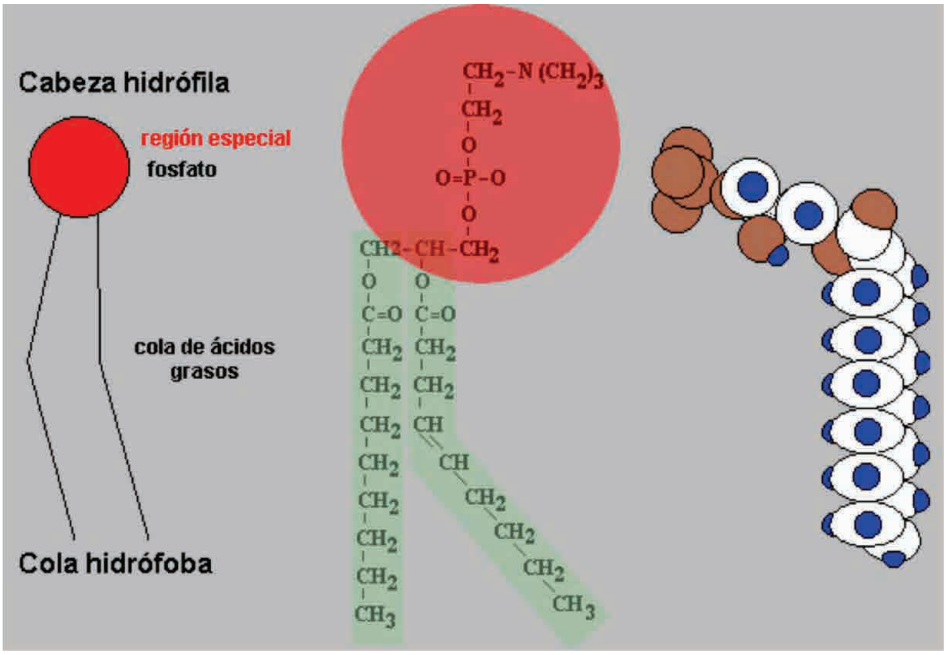
12.6 Lípidos complejos

Son lípidos saponificables, en cuya estructura molecular, además de carbono, hidrógeno y oxígeno, hay nitrógeno, fósforo, azufre o un glúcido.

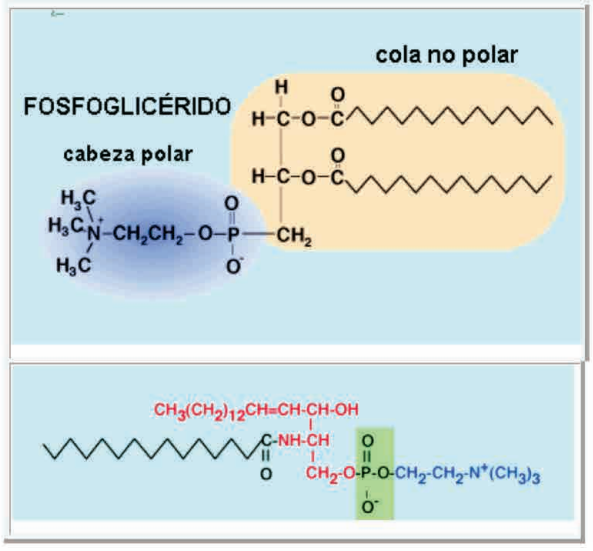
Son las principales moléculas constitutivas de la doble capa lipídica de la membrana celular, por lo que también se llaman lípidos de membrana. También son moléculas anfipáticas.

Fosfolípidos

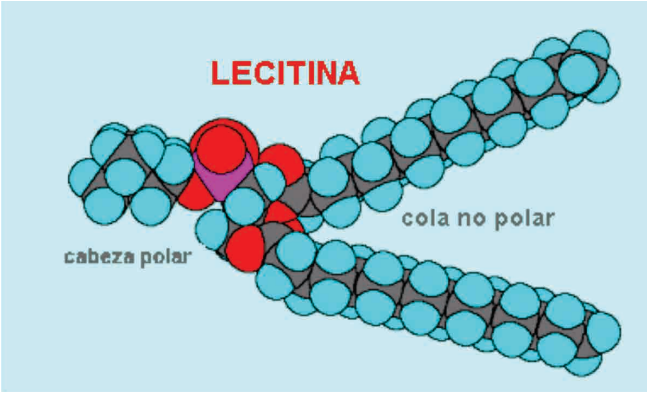
Se caracterizan por presentar el ácido ortofosfórico en su zona polar. Son las moléculas más abundantes de la membrana citoplasmática.



Son ejemplos de fosfolípidos: fosfatifilcolina (lecitina), fosfatidiletanolamina (cefalina), tienen al glicerol como alcohol; los esfingolípidos tienen esfingosina, como alcohol.



Esfingolípido



Glucolípidos

Son lípidos complejos que se caracterizan por poseer un glúcido. Forman parte de las bicapas lipídicas de las membranas de todas las células, especialmente de las *neuronas*. Se sitúan en la cara externa de la membrana celular, en donde realizan una función de relación celular, al ser receptores de moléculas externas que dan lugar a respuestas celulares.

12.7 Lípidos insaponificables

Terpenos
Son moléculas lineales o cíclicas que cumplen funciones muy variadas, entre las que se pueden citar:

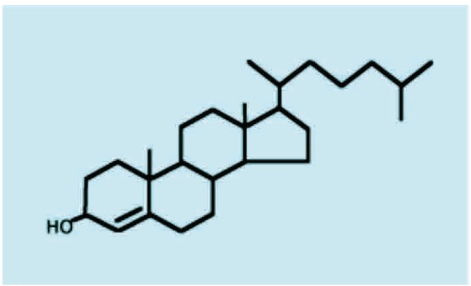
- Esencias vegetales, como mentol, geraniol, limoneno, alcanfor, eucaliptol, vainillina.
- Vitaminas, como las vitaminas A, E y K.
- Pigmentos vegetales, como la carotina y la xantofila.

Esteroides

Los esteroides son lípidos que derivan del esterano (ciclopentanperhidrofenantreno), comprenden dos grandes grupos de sustancias:

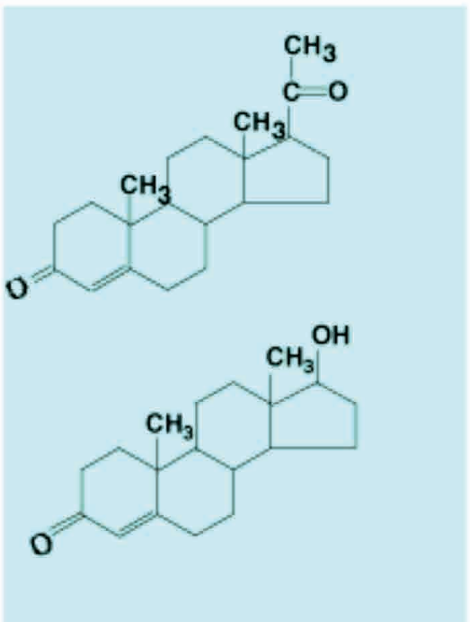
1. Esteroles: Como el colesterol y las vitaminas D.
2. Hormonas esteroideas: Como las hormonas suprarrenales y las hormonas sexuales.

Colesterol



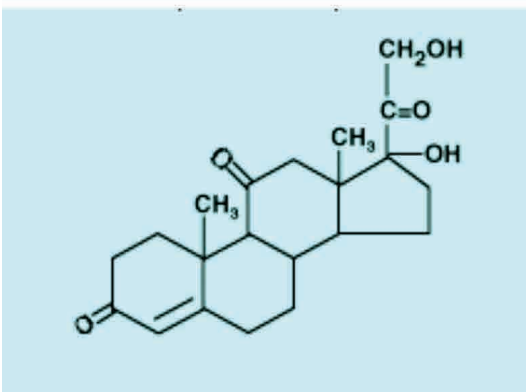
El colesterol forma parte estructural de las membranas a las que confiere estabilidad. Es la molécula base que sirve para la síntesis de casi todos los esteroides

Hormonas sexuales



Entre las hormonas sexuales se, encuentran la progesterona, que prepara los órganos sexuales femeninos para la gestación; y la testosterona, responsable de los caracteres sexuales masculinos.

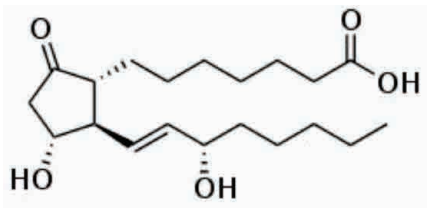
Hormonas suprarrenales



Entre las hormonas suprarrenales se encuentra la cortisona, que actúa en el metabolismo de los glúcidos, regulando la síntesis de glucógeno.

Prostaglandinas

Las prostaglandinas son lípidos cuya molécula básica está constituida por 20 átomos de carbono que forman un *anillo ciclopentano* y *dos cadenas alifáticas.*



Las funciones son diversas. Entre ellas se destaca la producción de sustancias que regulan la coagulación de la sangre y cierre de las heridas; la aparición de la fiebre como defensa de las infecciones; la reducción de la secreción de jugos gástricos. Funcionan como hormonas locales.

Práctica de aula – lípidos

1. Establecer la diferencia entre cada uno de los siguientes términos:

   a. Lípido saponificable y no saponificable.
   b. Triacilglicerol simple y triacilglicerol mixto.
   c. Grasa y aceite.
   d. Ácido graso saturado, ácido graso insaturado y ácido graso poliinsaturado.
   e. Cera y triacilglicerol.
   f. Fosfolípido y triacilglicerol.
   g. Hidrólisis e hidrogenación.

2. ¿Cuál es la diferencia estructural entre los triacilgliceroles en las grasas animales y en los aceites vegetales?
3. ¿Por qué una dieta carente de ácido linoleico sería nociva para la salud de un individuo?
4. ¿Qué información se obtiene del número de yodo de un lípido?
5. ¿Por qué la mantequilla se vuelve rancia?
6. ¿Por qué resulta eficaz inhalar una mezcla que contenga dipalmitoil fosfatidilcolina (DPFC) para evitar el colapso de los alveolos?
7. ¿Qué esteroide es uno de los componentes de las membranas celulares?

PRÁCTICAS EXPERIMENTALES

Medidas de seguridad y ambientales en el laboratorio

A. Recomendaciones generales

1. No deben efectuarse experimentos no autorizados, a menos que estén supervisados por el docente.
2. Cualquier accidente debe ser notificado de inmediato al docente o al técnico del laboratorio.
3. Uso indispensable del mandil como medida de protección.
4. No pipetear sustancias corrosivas como ácidos, bases, etc., porque puede ingerirlos.
5. Lea cuidadosamente la etiqueta del frasco hasta estar seguro de que es el reactivo que necesita; no utilice reactivos que estén en frascos sin etiqueta.
6. Después de que utilice un reactivo tenga la precaución de cerrar bien el frasco.
7. Los tubos y varillas de vidrio y objetos calientes deben colocarse en un lugar no accesible de la mesa de trabajo, para evitar quemaduras a sí mismo o a un compañero.
8. Los tubos de ensayo calientes, con líquido o no, deben colocarse en una gradilla de alambre o dentro de un vaso de precipitados.
9. Cuando se calientan sustancias contenidas en un tubo de ensayo, no se debe apuntar la boca del tubo al compañero o a sí mismo, ya que pueden presentarse proyecciones del líquido caliente.
10. La dilución de ácidos concentrados debe hacerse de la siguiente manera:
    a. Utilizar recipientes de pared delgada.
    b. Añadir lentamente el ácido al agua, resbalándolo por las paredes del recipiente, al mismo tiempo que se agita suavemente. Nunca añadir agua al acido, ya que puede formarse vapor con violencia explosiva.
    c. Si el recipiente en el que se hace la dilución se calentara demasiado, interrumpir de inmediato y continuar la operación en baño de agua o hielo.
11. No se debe probar ninguna sustancia. Si algún reactivo se ingiere por accidente, se notificará de inmediato al docente.
12. No manejar cristalería u otros objetos con las manos desnudas si no se tiene la certeza de que están fríos.
13. No se debe oler directamente una sustancia, sino que sus vapores deben abanicarse con la mano hacia la nariz.
14. No tirar o arrojar sustancias químicas al desagüe. En cada práctica, preguntar al profesor sobre los productos que se pueden arrojar al desagüe para evitar la contaminación de los ríos y el mar.
15. Cuando en una reacción se desprendan gases tóxicos o se evaporen ácidos, la operación deberá hacerse bajo una campana de extracción.
16. Los frascos que contengan los reactivos a emplear en la práctica deben mantenerse tapados en tanto no se usen.
17. No trasladar varios objetos de vidrio al mismo tiempo.
18. No ingerir alimentos ni fumar dentro del laboratorio.
19. Mantener una adecuada disciplina durante la estancia en el laboratorio.
20. Estar atento a las instrucciones del docente.

B. ¿Qué hacer en caso de accidente?
En caso de accidente en el laboratorio, hay que comunicarlo inmediatamente al docente.

Quemaduras por ácidos y álcalis
Limpiar con un paño seco el reactivo y lavar la parte afectada, con abundante agua. Si la quemadura fuera en los ojos, después de lavado, acudir al servicio médico.
Si la salpicadura fuera extensa, llevar inmediatamente al lesionado a la ducha y, luego, acudir al servicio médico.

Quemaduras por objetos, líquidos o vapores calientes
Aplicar pomada contra quemaduras o pasta dental en la parte afectada. En caso necesario, proteger la piel con gasa y acudir al servicio médico.

C. Recomendaciones para el alumno durante el experimento
1. El laboratorio de química es un lugar donde se desarrollan prácticas elegidas por el docente para confirmar y reafirmar los conocimientos teóricos impartidos en el salón de clase.
2. Cada alumno es parte de un equipo o grupo de trabajo, el cual se mantiene hasta finalizar el semestre.
3. Al realizar cada práctica, deben seguirse las instrucciones dadas por el profesor y las establecidas en el manual. Observar y registrar lo sucedido durante el experimento.
4. No cambiar los reactivos de una mesa; éstos son puestos completos en la mesa de trabajo. Si llegara a faltar algún reactivo en la mesa, solicitarlo al encargado (a), no lo tome de otra mesa, pues esto ocasiona pérdida de tiempo a los demás y altera el desarrollo normal de la práctica.
5. Se brinda asesoría a cada grupo de trabajo para la solución de preguntas durante el desarrollo de la práctica.
6. Cuando el experimento no resulta como estuvo planeado, el alumno debe investigar, consultar y agotar todas las posibilidades para lograr un desarrollo correcto. Si no se logra el objetivo de la práctica, debe preguntar al docente. El explicará la causa de la falla y la manera de corregirla. De esta forma, se logrará desarrollar una actitud crítica hacia la materia, un mejor aprovechamiento de la clase práctica y un apoyo mayor a la clase teórica.
7. Al terminar la práctica, debe dejarse limpio el material usado, así como el lugar de trabajo. Los materiales sólidos deben arrojarse al tacho de basura y las soluciones al desagüe, excepto aquellas que por su toxicidad deben guardarse en recipientes indicados por el profesor.

Práctica 1

Separación de una mezcla binaria-extracción discontinua

1. Objetivos

1.1 Separar los componentes de una mezcla binaria, basada en sus diferencias de propiedades.
1.2 Purificar las sustancias obtenidas, empleando técnicas adecuadas.
1.3 Manipular materiales empleados en una extracción discontinua.

2. Fundamento teórico

La extracción líquido-líquido es una de las operaciones frecuentes en un laboratorio de química orgánica, dado que numerosas reacciones conllevan el empleo de esta técnica en la manipulación de las mismas para el aislamiento de los productos.

Los ácidos carboxílicos pueden reaccionar con bases, tales como bicarbonato sódico, carbonato sódico o hidróxido sódico, cediendo un protón y formando los correspondientes aniones, los cuales son solubles en agua. Contrariamente, el 1-naftol no es lo suficientemente ácido para formar sales solubles en medio acuoso.

En esta práctica se separa los componentes de una mezcla compuesta por 1-naftol y ácido benzoico, disuelta en un disolvente orgánico, como el cloruro de metileno, aprovechando el mayor carácter ácido de uno de los componentes de dicha mezcla.

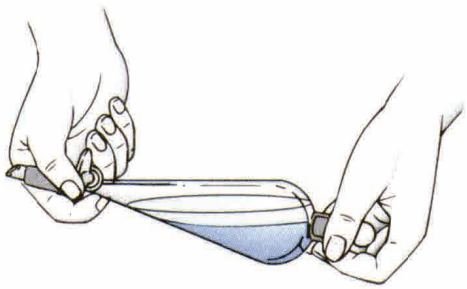
3. Material y equipo

Material	Montajes	Reactivos
Embudo de decantación	Equipo de filtración por gravedad	Disolución problema
Erlenmeyer	Equipo de filtración por succión	Ácido clorhídrico, 3M
Embudo cónico	Rotavapor	Bicarbonato sódico, 10%
Vaso de precipitados	Equipo de destilación simple	Cloruro de metileno
Büchner		Cloruro de calcio
Kitasato		Etanol, 75%

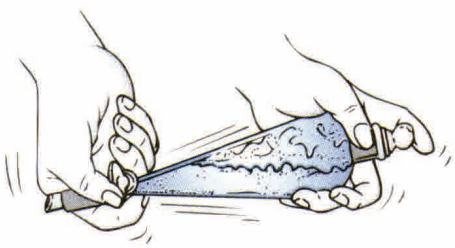
4. Procedimiento

4.1 Separación de los componentes de la mezcla.
Disuelva la mezcla de 1,0 g de ácido benzoico y 0,5 g de 1-naftol en 50 mL de diclorometa-

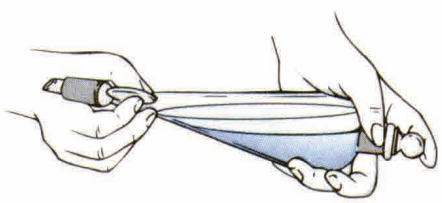
no en un vaso de precipitados. A continuación, transfiérala a un embudo de decantación de 250 mL y proceda a extraer dos veces con 20 mL de $NaHCO_3$ al 10%. Reciba la fase acuosa en un vaso de precipitados: "A".



(a)



(b)

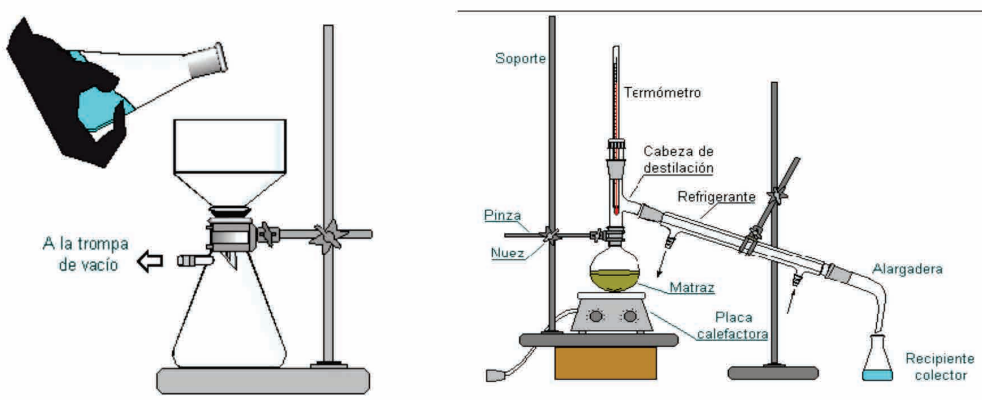


(c)

La fase orgánica "B", Guárdelo en un matraz seco y agregue unos granos de $CaCl_2$ anhidro. Tápelo.
Neutralice el extracto acuoso "A", agregando HCl 3M en pequeñas porciones hasta pH = 1-3. Destruya la espuma con una varilla de vidrio. Calcule previamente el volumen mínimo de HCl 3M que necesitará para la neutralización.

El ácido benzoico forma un precipitado. Fíltrelo a través de un disco de papel de filtro en un embudo Büchner (filtración por succión). Lave los cristales de ácido benzoico en el embudo, con agua destilada fría.

Secar el producto crudo al aire y guárdarlo en papelillos etiquetados con su nombre y el del compuesto.



Para obtener el 1-naftol, proceda a armar un equipo de destilación simple. Coloque un embudo con una mota de algodón y filtre la solución "B" directamente al balón de destilación. Destile a sequedad utilizando baño-maría. El residuo del matraz de destilación será purificado posteriormente. Mida el volumen de CH_2Cl_2 recuperado y entréguelo.

4.2 Recristalización del ácido benzoico

Pese el ácido benzoico obtenido y proceda a recristalizar de 30 mL de agua. Filtre por succión y entregue el producto envuelto en un papelillo para ser secado y pesado. Identificarlo con el nombre del compuesto y de la mesa de trabajo.

4.3 Recristalización del 1-naftol

Pese el 1- naftol y recristalizarlo en etanol al 75 %, con aproximadamente 10 mL. Filtre los cristales obtenidos por succión y séquelos al aire. Envuélvalos en un papelillo y entréguelos con el nombre del producto y número de mesa de trabajo.

Informe 1

Título: _____

_____

Nombre: _____

Mesa: _____ **Turno:** _____ **Fecha:** _____

Cuestionario

1. ¿Cuál es la diferencia entre la extracción discontinua y la continua?

2. Formular la ecuación de reacción entre el ácido benzoico y el bicarbonato de sodio

3. ¿Por qué el 1-naftol es extraído en la fase diclorometano?

4. ¿Cuáles son las condiciones que debe reunir un solvente empleado para realizar una recristalización?

5. ¿Qué función desempeña una sal anhidra? Proponer tres ejemplos.

6. ¿Por qué es necesario destapar el embudo de decantación durante el proceso de extracción cada vez que se agita?

Práctica 2
Cromatografía

I. Objetivos

1. Aplicar técnicas sencillas de laboratorio para el análisis preliminar de productos vegetales.
2. Utilizar el equilibrio de partición y adsorción en técnicas cromatográficas con fines analíticos y de separación de metabolitos secundarios.

II. Fundamento teórico

La cromatografía es una técnica de separación versátil que presenta distintas variantes. En toda separación cromatográfica hay dos fases (sólida, líquida o gaseosa) una móvil y otra estacionaria, que se mueven una con respecto de la otra, en contacto íntimo. La muestra se introduce en la fase móvil y los componentes de la muestra se distribuyen entre la fase estacionaria y la móvil. Los componentes de la mezcla a separar invierten un tiempo diferente en recorrer cada una de las fases, con lo que se produce la separación. Si un componente está la mayor parte del tiempo en la fase móvil el producto se mueve rápidamente, en tanto que si se encuentra la mayor parte en la fase estacionaria, el producto queda retenido y su salida es más lenta. Los sistemas de cromatografía más comunes son:

Tipo	Fase estacionaria	Fase movil
líquido-sólido	sólido inerte como gel de sílice o alúmina	disolventes
Intercambio iónico	resina cambiadora	soluciones acuosas
Líquido-líquido	líquido adsorbido en un soporte sólido	líquido
gas-líquido	película de líquido adsorbida sobre un soporte sólido	gas

En química orgánica, la cromatografía líquido-sólido es la más utilizada, en sus dos variantes: cromatografía en columna (CC) y cromatografía de capa fina (TLC).

La técnica de cromatografía en capa fina (TLC) entre otras cosas, permite:

- Separar los componentes de una mezcla.
- Determinar el grado de pureza de un compuesto.
- Comparar muestras.
- Realizar el seguimiento de una reacción.
- Controlar el contenido de las fracciones obtenidas en cromatografía de columna

La cromatografía en capa fina usa como fase estacionaria un sólido como sílica-gel o alúmina conteniendo algún material que hace que se mantenga la fase estacionaria sobre un soporte tal como placas de vidrio, aluminio e incluso materiales plásticos. Las placas pueden prepararse en el laboratorio o adquirirse en el mercado.

En esta experiencia se aislarán los pigmentos naturales contenidos en la zanahoria y los metabolitos secundarios de una planta de uso medicinal, mediante la cromatografía. Para aislarlos de la muestra original se utilizará el equilibrio de partición sólido-líquido o extracción sólido-líquido

Los pigmentos naturales, es decir, la materia colorante, se encuentran en los seres vivos; por su estructura molecular, están clasificados en: carotenoides, flavonoides, antocianinas y betalainas; quinónicos, los diarilmetanos, curcumina y cuercuminoides; indigoides y derivados del indol, pirimidinas y tetrapirroles; porfirinas.

III. Materiales y reactivos

2 Tubos de ensayo	1 Capilar
3 Lunas de reloj	Cromatofolios
Cuchillo	Varilla de vidrio
Porta muestra a la gota	Tijera
2 Pipetas Pasteur	Clorofomo
4 Vasos	Metanol (comercial)
Planta seca y pulverizada	Zanahoria

IV. Procedimiento

A. Preparación del extracto con pigmento natural

1. En un tubo de ensayo colocar trocitos de zanahoria hasta una altura de 2 cm y agregar cloroformo hasta cubrirlos. Agitar hasta observar la extracción del pigmento natural.
2. Colocar una pequeña cantidad del extracto clorofórmico en una placa de toques, usando una pipeta de Pasteur, para que se concentre por evaporación el solvente.

B. Preparación del extracto metanólico de una planta de uso medicinal

1. Extraer mediante un equipo de Soxhlet los metabolitos secundarios de una planta, usando etanol como solvente.
2. Colocar una pequeña cantidad del extracto etanólico en un portamuestra, usando una pipeta de Pasteur, para que se evapore un poco el solvente.

C. Separación cromatográfica

1. Recortar tres cromatofolios de aproximadamente 1,5 cm de ancho por 7 cm de largo y trazar una línea (0.5 cm del borde inferior) donde se sembrará el concentrado respectivo, utilizando un capilar (Figura 1). En dos placas sembrar el concentrado de zanahoria y en el tercero sembrar el concentrado de la planta.

2. Paralelamente, numerar tres vasos y agregar: en el Nº1, acetato de etilo; en el Nº2, éter de petróleo y en el Nº3, la mezcla de acetato de etilo-cloroformo en una proporción 4:6, en cantidades suficientes para que se cubra el fondo de cada vaso.
3. Tapar los vasos con una luna de reloj o caja petri y durante unos minutos, hasta que se sature con los vapores de la mezcla. Luego, introducir la placa cromatográfica sembrada, de manera que el solvente no toque la zona de siembra, sino que la alcance al subir por capilaridad. En el vaso 1 y 2 colocar el cromatofolio sembrado con extracto de zanahoria y en el 3, el cromatofolio sembrado con extracto de la planta.

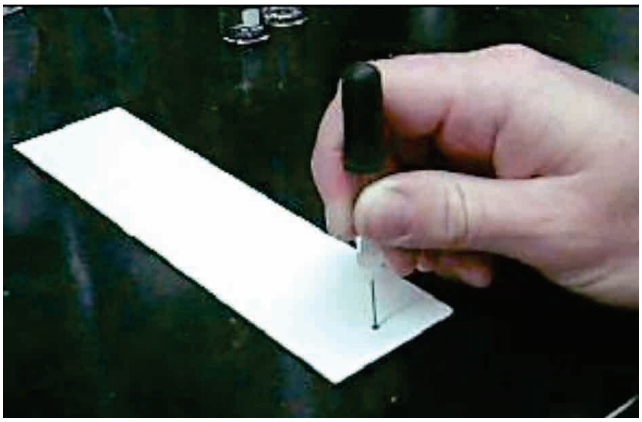
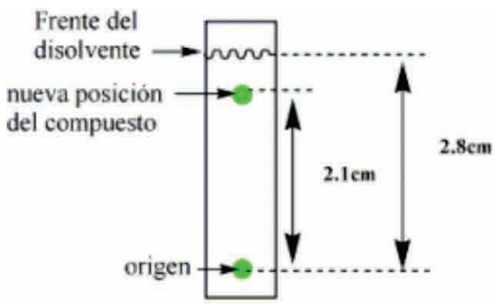


Figura 1

4. Dejar ascender el solvente por la placa hasta que se encuentre entre 1,0 y 0,5 cm de su borde superior. En ese instante, retirar la placa y comparar los resultados (Figura 2). Observar a simple vista y con la ayuda de una lámpara UV los componentes presentes y marcarlos con un lápiz.
5. Determinar el R_f para cada componente y tabular los resultados.



$$R_f = \frac{2.1}{2.8} = 0.75$$

Figura 2

Informe 2

Título: _____

_____

Nombre: _____

Mesa: _____ **Turno:** _____ **Fecha:** _____

Cuestionario

1. Definir cromatografía.

2. ¿Qué es un sistema de solventes?

3. ¿Qué significa si la mezcla sembrada en una placa de sílica-gel origina un Rf igual a 1?

4. ¿Qué significa que una mezcla sembrada en una placa de silica-gel origina un Rf igual a cero?

5. ¿Cuál de los sistemas de solventes empleados fue el más adecuado para cada muestra (zanahoria y planta medicinal)?

Práctica 3
Destilación por arrastre con vapor

1. Objetivos

1.1. Explicar y discutir la técnica de destilación por arrastre con vapor.
1.2. Aplicar la técnica de destilación por arrastre con vapor para extraer aceite esencial de una fruta.

2. Fundamento teórico

L os componentes volátiles de las plantas son una fuente de compuestos orgánicos valiosos para la preparación de perfumes, aromatizantes, conservadores de alimentos, productos farmacológicos, entre otros. Estos componentes se aíslan de las plantas, generalmente, por destilación por arrastre con vapor de agua (corriente de vapor). Las mezclas de componentes volátiles obtenidas, que son inmiscibles en agua, son conocidas bajo el nombre de aceites esenciales. A pesar de constituir una fracción pequeña del contenido de una planta, los aceites esenciales son los responsables de los olores y aromas presentes en ella.

Los terpenos son los constituyentes principales de un aceite esencial. Estructuralmente, están formados por la condensación o unión biosintética de un número variable de moléculas de isopreno (2-metilbutadieno), que es la unidad básica, alcanzando eventualmente diversos niveles de oxidación a través de la formación de grupos funcionales oxigenados (alcoholes, éteres, aldehídos, cetonas, y otros).

El limoneno es el terpeno cíclico más abundante en la naturaleza, constituye el 90-95 % del aceite esencial de la naranja. También está presente en los aceites de limón y algunas variedades de eneldo y menta.

3. Materiales y reactivos

- Equipo de destilación por arrastre de vapor
- Placa de calentamiento
- Vasos
- Tubos de ensayo
- Cáscara de naranja rayada (100 g)
- Solución de $KMnO_4$
- Solución de $NaHCO_3$
- Solución de Br_2 en agua

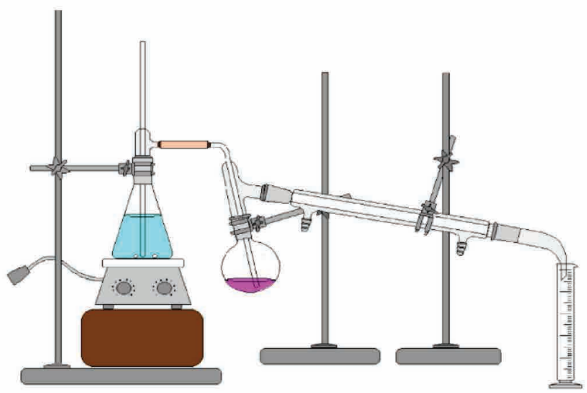
4. Procedimiento

Colocar aproximadamente 150 g de cáscara de naranja o de limón rayada en un balón de dos cuellos de 1 L. Instalar en el cuello central un cabezal doble de destilación de Claisen. En el cuello lateral adapte un tubo de burbujeo.

Agregar 300 mL de agua caliente. Conectar el generador de vapor al tubo de burbujeo y comience a destilar (Figura 1). En el matraz donde está el material a extraer debe mantener más o menos la misma cantidad de agua durante todo el proceso; para ello, se hace necesario calentarlo externamente en forma suave. Para comprobar si la destilación ha sido completa recoja 1 a 2 mL del condensado en 1 tubo de ensayo y obsérvelo; la aparición de gotas de aceite en la fase acuosa indica que aún quedan componentes volátiles. En este caso, agregar el contenido del tubo de ensayo al recipiente colector y continuar la destilación. Si se observa una sola fase, dar por finalizada la destilación.

5. Prueba de insaturación del limoneno

Realizar en forma cualitativa el ensayo con la solución de $KMnO_4$ en medio básico y con Br_2 en agua. La formación de un precipitado de color marrón en el primer caso y decoloración de la solución de Br_2 en el segundo, indican la prueba positiva de insaturación en el limoneno.



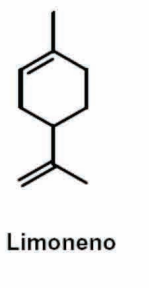


Figura 1. Equipo para destilación por arrastre con vapor

Informe 3

Título: _____

_____

Nombre: _____

Mesa: _____ **Turno:** _____ **Fecha:** _____

Cuestionario

1. Escriba el nombre sistemático del limoneno.

2. ¿Por qué los aceites esenciales se pueden destilar por arrastre con vapor?

3. ¿Con la técnica de destilación por arrastre con vapor, la sustancia de interés destila a mayor o menor de 100 ºC?

Práctica 4
Modelos moleculares

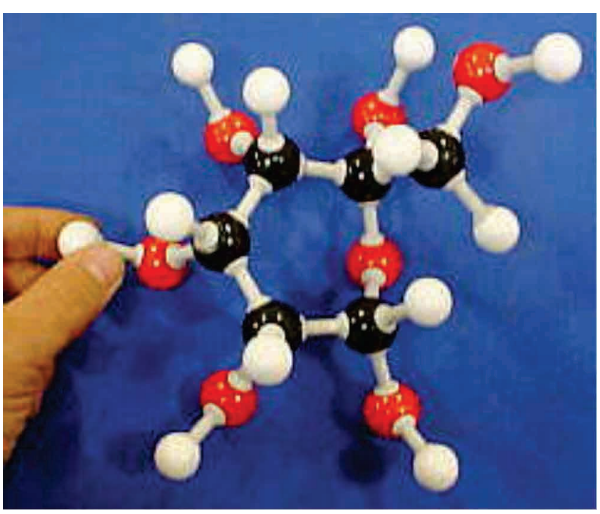
1. Objetivos

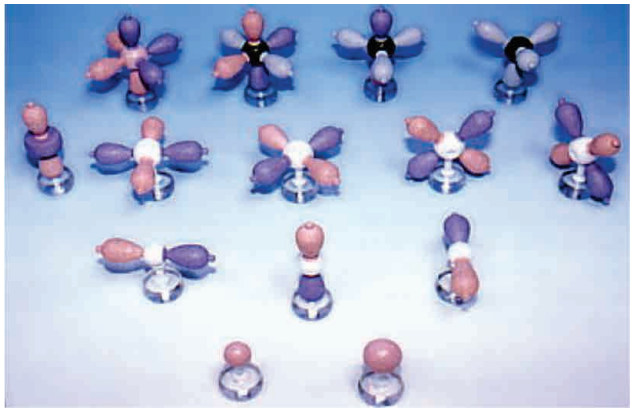
1.1. Representar tridimensionalmente los diferentes compuestos orgánicos, mediante modelos moleculares.
1.2. Explicar las diferencias más importantes entre los diferentes grupos funcionales orgánicos, usando modelos moleculares.

2. Fundamento teórico

La química orgánica es la rama de la química que estudia los compuestos orgánicos, su estructura y reactividad. Para entender la estructura de los compuestos orgánicos es necesario imaginarlos en el espacio; es decir, *visualizar* su geometría tridimensional.

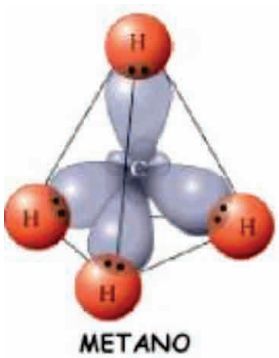
Los modelos moleculares son un conjunto de piezas de plástico, de madera o metálicas con los que se pueden representar simples, dobles y triples enlaces, presentes en moléculas acíclicas y cíclicas.



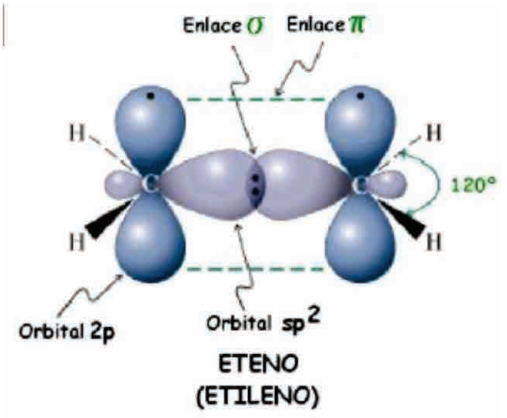


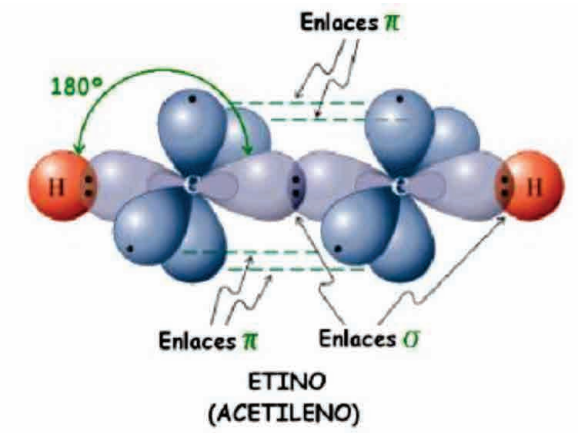
Hibridaciones del átomo de carbono

sp^3 Geometría tetraédrica, puede formar cuatro enlaces sigma (σ).
sp^2 Geometría triangular plana, puede formar tres enlaces sigma (σ) y un enlace pi (π).
sp Geometría lineal, puede formar dos enlaces sigma (σ) y dos enlaces pi (π).



METANO





3. Materiales

Juego de modelos moleculares
Modelos de madera

4. Procedimiento

Use los modelos moleculares para construir los siguientes compuestos, identificar los grupos funcionales y las hibridaciones de los elementos C, H y N.

1) CH_3-CH_2-CH_2-CH_3

2) CH_3-CH=CH_2

3) CH_3-C≡CH

4) $(CH_3)_2$C=CH-CHO

5) CH_3-CH_2-OH

6) CH_3-CO-CH_3

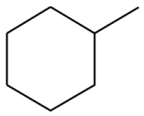
7) CH_3-COOH

8) CH_3-CH_2-C≡N

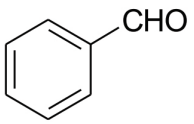
9) CH_3-O-CH_3

10) CH_3-COO-CH_2-CH_3

11) CH_3-NH_2

12) 

13) CH_3-$CONH_2$

14) 

Informe 4

Título: _____

_____

Nombre: _____

Mesa: _____ **Turno:** _____ **Fecha:** _____

Cuestionario

1. ¿Qué grupos funcionales están presentes en los compuestos 7, 10, 13 y 14; y cuántos enlaces pí tiene cada molécula?

7: _____

10: _____

13: _____

14: _____

2. Dibujar la molécula 8 y 10

Práctica 5
Espectroscopia infrarroja

1. Objetivos

1.1. Explicar los principios teóricos de la técnica de espectroscopia infrarroja.
1.2. Analizar un espectro infrarrojo e identificar los principales grupos funcionales orgánicos.

2. Fundamento teórico

La espectroscopia infrarroja es una técnica que permite identificar los grupos funcionales en un compuesto orgánico, mediante el registro de las vibraciones de ciertos grupos de enlaces, espectro IR, debido a absorciones de radiaciones infrarrojas, normalmente, a 600-4000 cm^{-1}. El espectro IR se puede dividir en dos zonas: zona de grupos funcionales y zona de la huella digital. Con el conocimiento de la posición que ocupan las bandas de los grupos funcionales y por comparación con una carta de correlación, se puede determinar, en muchos casos, con facilidad la función orgánica que posee; pero, en muchos casos, no es suficiente información para determinar la estructura completa del compuesto.

3. Material

Diapositivas
Espectros

4. Procedimiento

- El profesor explicará el fundamento teórico de esta técnica.
- Realizará algunos ejemplos de aplicación.
- El estudiante determinará la estructura de algunos compuestos proporcionados por el profesor, a través de la identificación de los grupos funcionales, empleando cartas de correlación.

Informe 5

Título: _____

_____

Nombre: _____

Mesa: _____ **Turno:** _____ **Fecha:** _____

Cuestionario

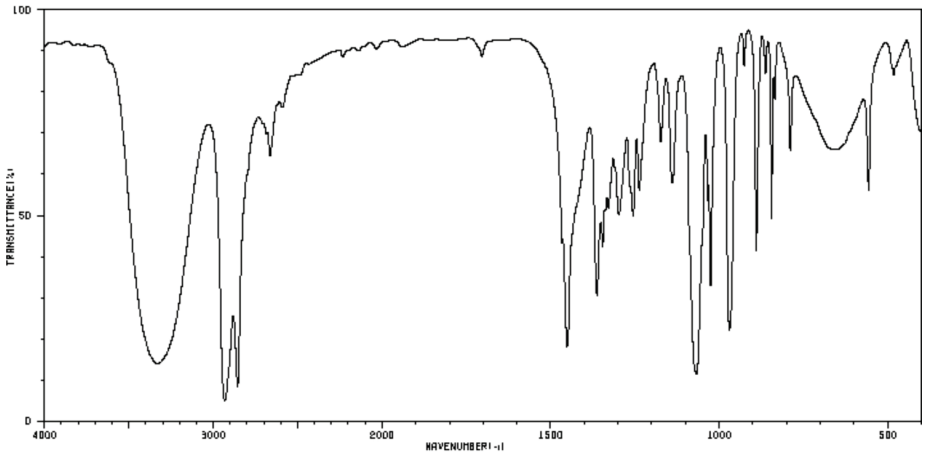
1. ¿Qué es radiación electromagnética?

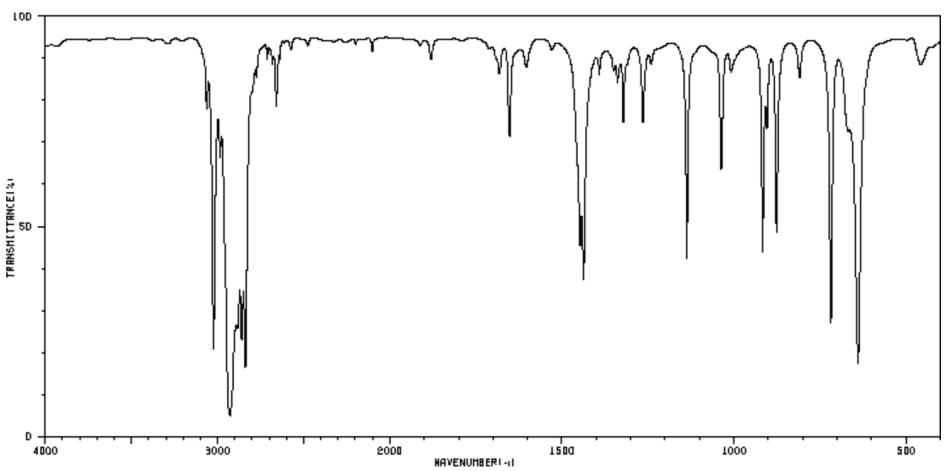
2. ¿Qué es radiación infrarroja?

3. ¿Qué es un espectro IR?

4. ¿Por qué en ciertos grupos funcionales sus señales son más intensas que otros?

5. Se muestran los espectros IR del ciclohexeno y ciclohexanol. Determinar, razonablemente, que espectro corresponde a cada uno de los compuestos mencionados.





Práctica 6
Síntesis de cloruro de t-butilo

1. Objetivos

1.1. Obtener el haluro de alquilo terciario a partir del alcohol t-butílico mediante una reacción de sustitución nucleofílica.
1.2. Aplicar métodos de identificación espectroscópicos y cualitativos.

2. Fundamento teórico

La conversión de alcoholes en haluros de alquilo se puede efectuar por varios procedimientos. Con alcoholes primarios y secundarios se usan, frecuentemente, cloruro de tionilo o haluros de fósforo; también, por calentamiento del alcohol con ácido clorhídrico concentrado y cloruro de zinc anhidro, o usando ácido sulfúrico concentrado y bromuro de sodio. Los alcoholes terciarios se convierten al haluro de alquilo correspondiente sólo con ácido clorhídrico y, en algunos casos, sin necesidad de calentar.

3. Material y reactivos

Agitador magnético
Baño de agua eléctrico
Barra de agitación magnética
Colector
Embudo de separación
Embudo de filtración rápida
Espátula de acero inoxidable
"T" de destilación
Mangueras p/refrigerante
Matraz bola de 25 mL
Matraz Erlenmeyer de 50 mL
Ácido clorhídrico conc.
Alcohol ter-butílico
Cloruro de calcio
Matraz Erlenmeyer de 125 mL
Pinzas de tres dedos con nuez
Portatermómetro
Probeta graduada 25 mL
Recipiente de peltre
Refrigerante
Vaso de pp de 250 mL

Tapón de corcho (No. 5)
Tapón esmerilado 14/23
Termómetro -10 a 400 ºC
Carbonato de sodio al 10 %
Sulfato de sodio anhidro

4. Procedimiento

En un matraz Erlenmeyer de 125 mL con tapón coloque: 6 mL de alcohol t-butílico, 18 mL de ácido clorhídrico concentrado y 2.0 g de cloruro de calcio; mezcle con agitación vigorosa por medio de un agitador magnético durante 15 minutos. Transfiera el contenido del matraz a un embudo de separación; deje reposar hasta la separación de fases; elimine la capa inferior (Nota 1); lave dos veces el cloruro de ter-butilo formado con una solución de carbonato de sodio al 10 % (5 mL cada vez, Nota 2). Seque el cloruro de ter-butilo con sulfato de sodio anhidro y purifíquelo por destilación simple (Nota 3). Recoja la fracción que destila a 42-45 ºC.

	t-Butanol	Cloruro de *t*-butilo
Masa molar (g/mol)		
Densidad (g/mL)		
Punto de fusión o ebullición (°C)		
Masa (g)		
Volumen (mL)		
Cantidad de sustancia (mol)		

NOTAS

1. La fase inferior corresponde al HCl residual.
2. Durante los lavados, el cloruro de ter-butilo está en la fase superior. Consulte la densidad del cloruro de ter-butilo.
3. Use un sistema de destilación sencilla, caliente el matraz sumergido con un baño maría. Reciba el destilado en un matraz sumergido en un baño de hielo.

Informe 6

Título: _____

_____

Nombre: _____

Mesa: _____ **Turno:** _____ **Fecha:** _____

Cuestionario

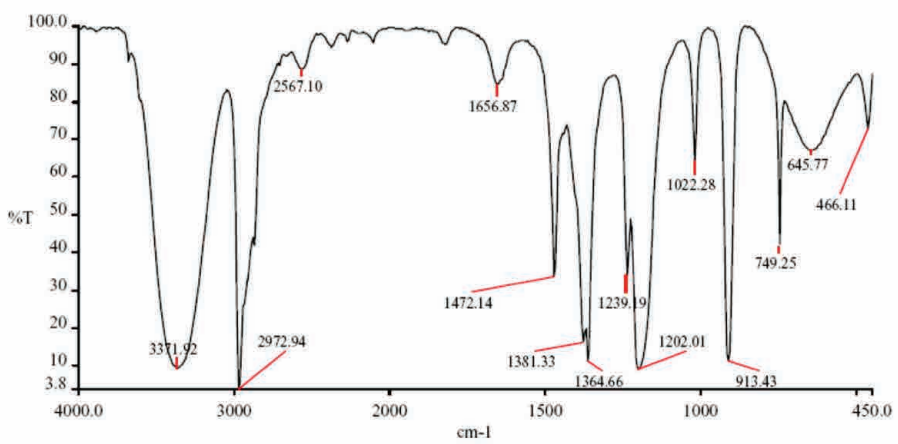
1. Formule los posibles productos secundarios que se puedan formar en el proceso.

2. ¿Qué función desempeña el cloruro de calcio en el proceso?

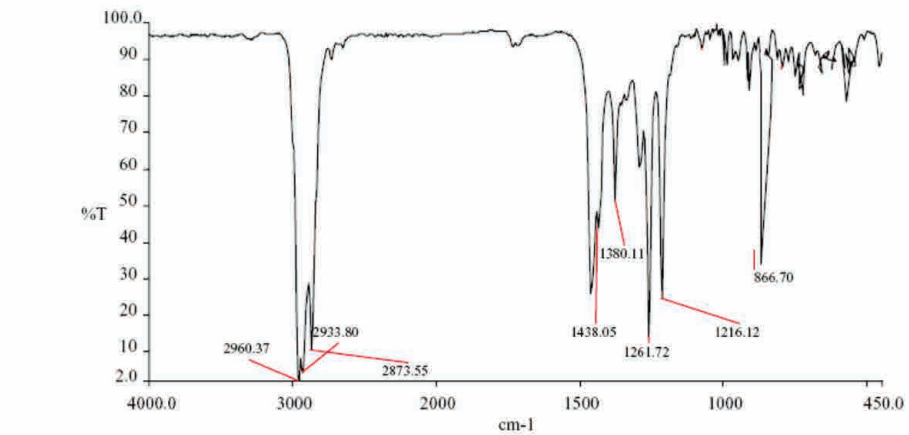
3. Proponga el posible mecanismo de reacción

4. Asigne las bandas principales a los grupos funcionales presentes en los espectros de IR de reactivos y productos.

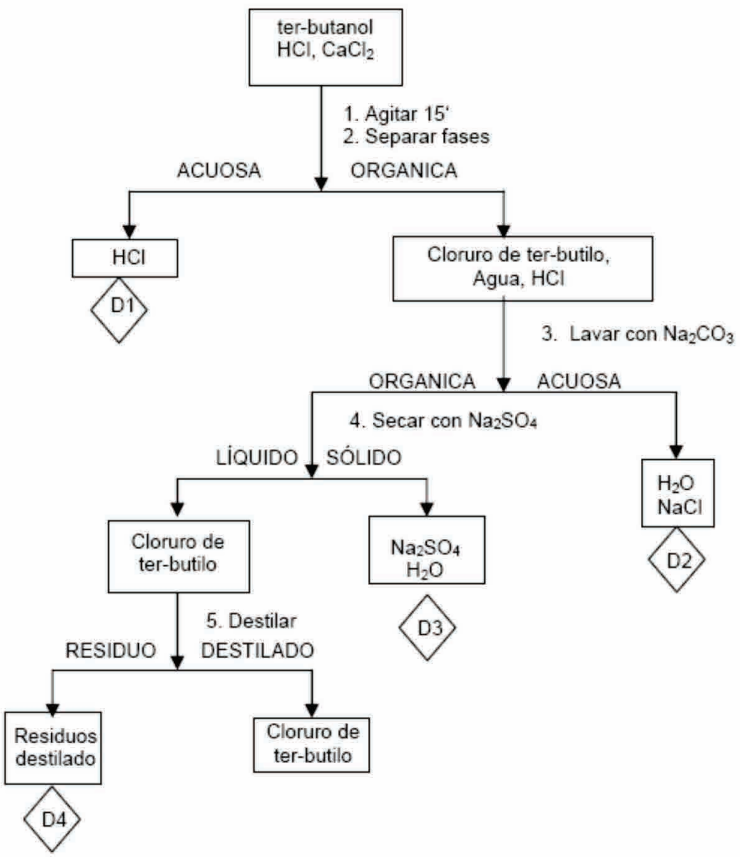
a) *ter*-butanol



b) Cloruro de *ter*-butilo



OBTENCIÓN DE CLORURO DE ter-BUTILO



Práctica 7
Síntesis de acetato de etilo

1. Objetivos

1.1. Realizar la ebullición a reflujo de un solvente.
1.2. Purificar sustancias líquidas mediante destilación simple.
1.3. Usar la destilación con rectificación para la separación de componentes de mezclas líquidas.

2. Fundamento teórico

Los ésteres de ácidos carboxílicos se pueden formar por reacción entre un ácido carboxílico y un alcohol (a menudo llamada esterificación de Fischer), en presencia de un ácido prótico como catalizador, tal como el ácido clorhídrico o el sulfúrico o un catalizador ácido de Lewis tal como el trifluoruro de boro (usualmente formando un complejo con el éter dietítico), o por reacción de un derivado de ácido, tal como cloruro de ácido o anhídrido con un alcohol. Los ésteres son compuestos versátiles en la química orgánica y se utilizan ampliamente debido a que se convierten fácilmente en stros compuestos.

3. Material y reactivos

- Matraz de 250 mL
- Refrigerante de reflujo. Destilación simple
- Tubo de cloruro cálcico. Destilación con rectificación
- Refrigerante recto. Extracción líquido-líquido
- Placa calefactora
- Cabezal de destilación
- Termómetro
- Cola de destilación
- Refrigerante recto
- Columna Vigreaux
- Matraz Erlenmeyer
- Embudo de decantación
- Ácido acético glacial
- Ácido sulfúrico concentrado
- Etanol
- Cloruro cálcico

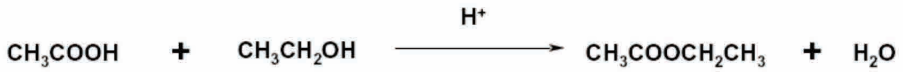
4. Procedimiento

En un matraz de boca esmerilada de 250 mL se colocar 40 mL de ácido acético glacial y 45 mL de etanol al 96%. Se añaden 5 mL de ácido sulfúrico, gota a gota, agitando continuamente y se adapta al matraz un refrigerante de reflujo y un tubo de cloruro cálcico (no olvidar añadir a la mezcla un trocito de plato poroso antes de poner el refrigerante). Una vez efectuado el montaje se procede a calentar a reflujo durante 1 hora. Luego se deja enfriar el contenido del matraz, se añade otro trozo de plato poroso y se modifica el montaje disponiéndolo para

una destilación simple con el objeto de separar el acetato de etilo formado junto al etanol que no ha reaccionado y algo de acético que se arrastra. La destilación se mantiene hasta que no destila más líquido, quedando en el matraz el ácido sulfúrico y el acético que no ha reaccionado.

El destilado se coloca en un embudo de decantación y se agita con una disolución de carbonato sódico al 10%, con la precaución de abrir la llave inmediatamente después mezclar los dos líquidos para la salida del CO_2, que se produce en la neutralización. El acetato de etilo se continúa lavando hasta no observar reacción ácida. La capa orgánica (superior) se separa y se lava con una solución constituida de 20 g de $CaCl_2$ en 25 mL de agua. Nuevamente, se decanta y se desecha la capa acuosa (inferior). La capa orgánica se transfiere a un Erlenmeyer seco, al que se le añade cloruro cálcico anhidro para adsover el agua que pueda contener.

La fase orgánica se separa del cloruro de cálcico (con agua) sedimentado y se somete a rectificación por destilación simple. El destilado entre 75 y 78 ºC se mide con una probeta y se calcula la cantidad en peso obtenida, considerando que la densidad del acetato de estilo es 0.9g/mL.



	Ácido acético	Etanol	Acetato de etilo
Masa molar (g/mol)			
Densidad (g/mL)			
Punto de fusión o ebullición (°C)			
Masa (g)			
Volumen (mL)			
Cantidad de sustancia (mol)			

Informe nº 7

Título: _____

_____

Nombre: _____

Mesa: _____ **Turno:** _____ **Fecha:** _____

Cuestionario

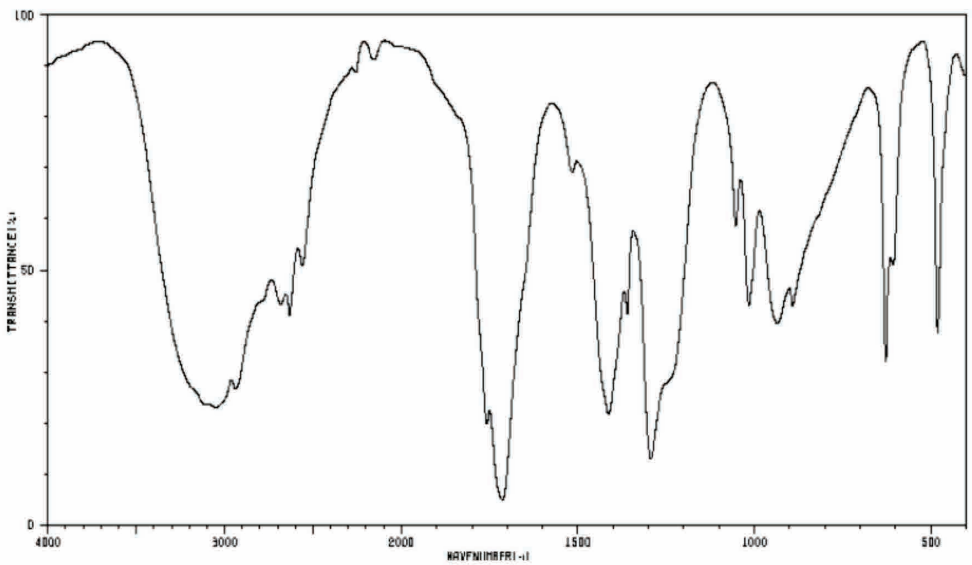
1. ¿Cuál es la función del carbonato de sodio al 10% al finalizar la reacción?

2. ¿Qué función desempeña el ácido sulfúrico en el proceso?

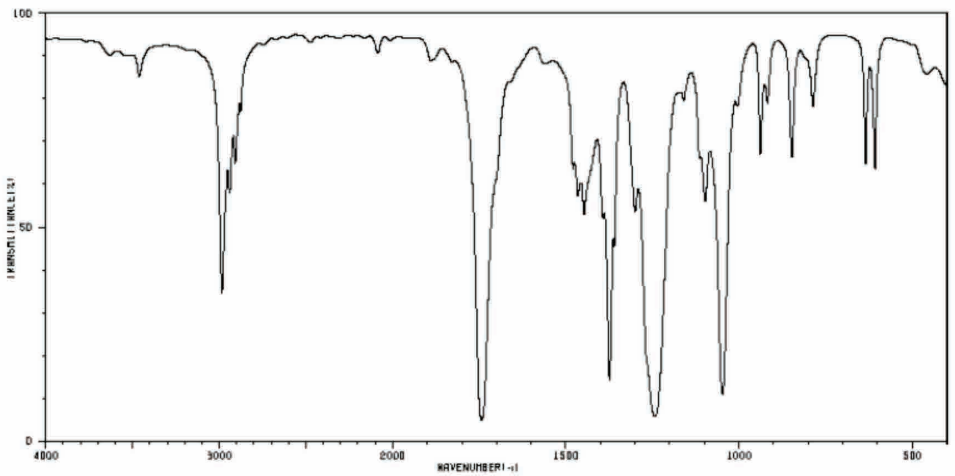
3. Proponer el posible mecanismo de reacción.

4. Asigne las bandas principales a los grupos funcionales presentes en los espectros de IR de reactivo y producto.

Espectro IR del ácido acético



Espectro IR del acetato de etilo



Práctica 8
Estereoisomería

1. Objetivos

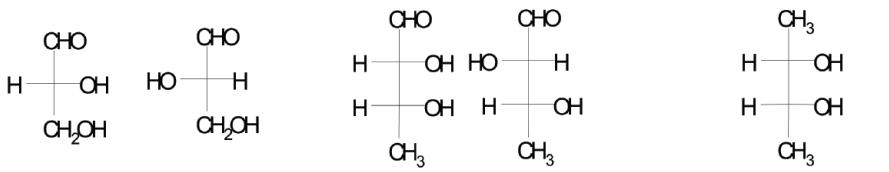
1.1 Ensamblar moléculas de estereoisómeros usando modelos moleculares.
1.2 Visualizar las diferencias estructurales de los isómeros.

2. Fundamento teórico

Los isómeros de configuración o estereoisómeros pueden ser geométricos y ópticos. La isomería geométrica *cis- y trans-* se presenta en alquenos y cicloalcanos. Los isómeros ópticos (enantiómeros, diasterómeros y compuesto meso) se presentan en los compuestos que se diferencian en su actividad óptica, o comportamiento frente a la luz polarizada.

Isómeros geométricos

Isómeros ópticos



3. Materiales y reactivos

Juego de modelos moleculares

4. Procedimiento

Usando los modelos moleculares ensamblar y dibujar los siguientes isómeros:

1. Geométricos del 2-penteno y 1,3-dimetilciclopentano
2. Enantiómeros del 2-butanol
3. Enantiómeros y diasterómeros del 3-cloro-2-metilbutanal
4. Compuesto meso del 1,2-dimetilciclohexano.

Informe 8

Título: _____

_____

Nombre: _____

Mesa: _____ **Turno:** _____ **Fecha:** _____

Cuestionario

1. ¿En qué tipos de compuestos se presenta la isomería geométrica?

2. ¿Qué es un polarímetro?

3. ¿Qué són enantiómeros?

4. ¿Qué se entiende por resolución racémica?

5. ¿Qué condición estructural debe tener un compuesto orgánico para que tenga actividad óptica?

Práctica 9
Carbohidratos

1. Objetivos

1.1 Establecer las características de las reacciones de oxidación de monosacáridos y disacáridos
1.2 Demostrar el carácter reductor de monosacáridos y disacáridos
1.3 Comparar el comportamiento entre el almidón y el (o los) productos de su hidrólisis frente al reactivo de Fehling.
1.4 Explicar las características del reactivo de Fehling y de Tollen's en su comportamiento con los azúcares.

2. Fundamento teórico

Los carbohidratos constituyen uno de los grupos más importantes de las biomoléculas. Se encuentran formando parte del material celular de los seres vivos.

Los carbohidratos también forman parte estructural de los ácidos nucleicos (ARN, ADN) y son almacenadores de energía.

Los carbohidratos se definen como aldehídos o cetonas polihidroxiladas o compuestos cuya hidrólisis conduzca a la formación de los compuestos antes mencionados.

2.1 Clasificación:

Polisacáridos: Celulosa, almidón, glucógeno, etc.
Oligosacáridos: Trisacáridos (rafinosa), Disacáridos (lactosa, maltosa, celobiosa, sacarosa, etc.).
Monosacáridos: Glucosa, ribosa, fructosa, xilosa, etc.

2.2 Reactividad de los monosacáridos

La química de los monosacáridos es la química de los grupos funcionales hidroxilo y carbonilo. La formulación de la glucosa como un pentahidróxialdehído de cadena lineal no justifica todas las reacciones de este compuesto.Las reacciones se pueden explicar si la glucosa existe en formas de hemiacetal cíclico; las que resultan de la adición intramolecular de un grupo hidroxilo al grupo carbonilo.

2.3 Representación de Haworth y conformacional de carbohidratos.

La formulación como un anillo de cinco miembros se denomina furanosa, por su analogía con el furano, en tanto que en la forma de un anillo de seis miembros se denomina piranosa por su analogía con el pirano.

2.4 Reacciones de los monosacáridos

2.4.1 Reacciones de oxidación

Azúcares reductores

La oxidación juega un papel muy importante en la química y análisis de carbohidratos. Los azúcares reductores dan reacciones positivas con los oxidantes suaves tales como los reactivos de Benedict y Fehling (Cu^{2+} -----> Cu^{+}) y el reactivo de Tollens (Ag^{+} ------> Ag^{o}).

2.4.2 Reacciones de hidrólisis

Los polisacáridos y los oligosacáridos (2 - 10 unidades de monosacáridos), sufren reacciones de hidrólisis en medio ácido obteniéndose unidades de menor tamaño.

Los disacáridos por hidrólisis producen:

Sacarosa : Glucosa + Fructosa
Maltosa : Glucosa + Glucosa
Lactosa: Galactosa + Glucosa

3. SECCION EXPERIMENTAL

3.1 Materiales, equipos y reactivos

Materiales	*Reactivos*
Tubos de ensayo	H_2SO_4 cc.
Vaso de 400 mL	Reactivo de Molisch
Cocina eléctrica	Reactivo de Fehling

Muestras
Muestras desconocidas 1 y 2

Reactivos
Sacarosa
Almidón

3.2 Experimentación

Prueba de Molisch

1. En un tubo de ensayo colocar 1 mL de solución de una muestra, 1 mL de agua destilada y 10 gotas del reactivo de Molisch.
2. Inclinar el tubo de ensayo y dejar resbalar, cuidadosamente, por las paredes, 2 mL de H_2SO_4 concentrado. No agitar.
3. La formación de un anillo violeta en la interfase indica resultado positivo.
4. Repetir los pasos anteriores con las demás muestras.

Prueba de Fehling

1. Usar 4 tubos de ensayo. En cada uno de ellos, mezclar 1 mL de solución de Fehling A con 1 mL de solución de Fehling B.
2. Adicionar las cuatro muestras (1 mL de solución), una en cada tubo.
3. Rotular cada muestra con un número del 1 al 4, y con un plumón marcar los tubos de ensayo para su identificación.
4. Introducir los tubos en un baño maría.
5. Observar si hay cambio de color, formación de precipitado y registrar el tiempo necesario para la aparición de un precipitado rojo ladrillo.

Hidrólisis de la sacarosa

1. En un tubo de ensayo colocar 2 mL de disolución de sacarosa.
2. Agregar 10 gotas de HCl_{CC} y calentar en baño maría por 15 minutos.
3. Adicionar dos gotas de fenolftaleína y, luego, neutralizar con NaOH.
4. Repetir el ensayo de Fehling con unas gotas de solución hidrolizada.

Reacción de almidón con el yodo

1. Tomar 10 mL de almidón y adicionarle una gota de yodo disuelto en yoduro de potasio (lugol).
2. Observar el cambio de color.
3. Calentar en baño maría la solución y anotar los cambios

4. Resultados

Completar el siguiente cuadro de resultados, marcando con (+) si la reacción es positiva y con (-), si la reacción es negativa.

Muestra de carbohidrato	Molisch	Fehling	
		Reacción	Tiempo
1			
2			
$Sacarosa_{(ac)}$			
$Almidón_{(ac)}$			

Informe 9

Título: _____

_____

Nombre: _____

Mesa: _____ **Turno:** _____ **Fecha:** _____

Cuestionario

1. ¿Qué son azúcares reductores?

2. ¿Cuál es el requisito estructural para que un azúcar sea reductor?

3. ¿Qué es el reactivo de Fehling?

4. ¿Por qué la sacarosa no da la reacción positiva con el reactivo de Fehling?

5. Formular la ecuación química de la glucosa con el reactivo de Fehling

6. ¿Por qué el almidón da coloración azul con el yodo?

Práctica 10
Aminoácidos y proteínas

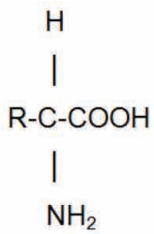
1. Objetivos

1.1 Explicar experimentalmente las pruebas de coloración comunes de los aminoácidos y proteínas.
1.2 Demostrar la presencia del enlace peptídico de las proteínas mediante reactivos específicos.

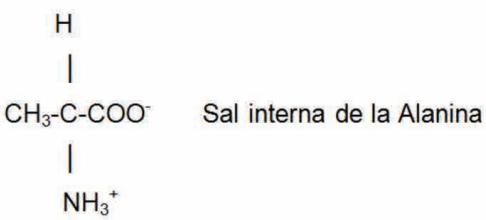
2. Fundamento teórico

2.1 Aminoácidos

Los aminoácidos son las unidades básicas en la estructura de los péptidos y proteínas. Los aminoácidos proteínicos o naturales son considerados en número de 20. Un aminoácido involucra la presencia de, como mínimo, un grupo amino y un grupo carboxilo. Las interacciones intermoleculares e intramoleculares entre las funciones ácidas y básicas desempeñan un papel importante en las propiedades fisicoquímicas de estos compuestos bifuncionales, cuya formulación general es:



Casi todos los aminoácidos de las proteínas poseen configuración relativa L. La propiedad más importante es el carácter anfótero (pueden actuar como ácidos o como bases). Los aminoácidos existen en realidad en forma de sus sales internas (*Zwitteriones*). Por ejemplo :



El punto isoeléctrico es el pH al cual el aminoácido se encuentra en su forma eléctricamente neutra.

$$pI = \tfrac{1}{2} (pKa1 + pKa_2)$$

En el punto isoeléctrico, el aminoácido no migra al electrodo positivo ni al negativo cuando se somete a la acción de un campo eléctrico. En el punto isoeléctrico la solubilidad es mínima.

2.2 Péptidos

La unión de dos o más aminoácidos mediante enlace de amida o enlace peptídico (-CO-NH-) forma un dipéptido. Cuando la unión es de tres aminoácidos se forma un tripéptido y si es de muchos aminoácidos se denomina polipéptido.

H_2N-CH(R)-CO-NH-CH(R)-COOH Dipéptido

H_2N-CH(R)-CO-NH-CH(R)-CO-NH-CH(R)-COOH Tripéptido

H_2N-CH(R)-CO-NH-CH(R)-CO-NH-CH(R)-CO~~ Polipéptido

2.3 Proteínas

Son polipéptidos naturales de elevado peso molecular (≥10 000). Se clasifican en proteínas simples (poseen sólo aminoácidos) y proteínas conjugadas (poseen aminoácidos y compuestos diferentes a los aminoácidos llamados grupos prostéticos). Los *grupos prostéticos* pueden ser ácidos nucleicos, sustancias coloreadas, carbohidratos, lípidos, vitaminas, metales y otros.

La estructura *primaria* de una proteína es la secuencia u orden de sucesión de sus aminoácidos y grupos prostéticos. Su determinación es por métodos químicos. Se entiende por estructuras *secundarias y terciarias* de las proteínas a las orientaciones tridimensionales de las macromoléculas, en tanto que la estructura cuaternaria describe la orientación de las diferentes cadenas en los complejos proteicos. Los rayos X y otras técnicas espectrales modernas son de utilidad para la elucidación de las características espaciales de las proteínas.

El proceso irreversible mediante el cual la conformación natural de una proteína es cambiada o destruida se conoce como ***desnaturalización***. Muchas proteínas deben ser desnaturalizadas para que la acción de las enzimas digestivas sea óptima. Por ejemplo la cocción de los alimentos.

3. Sección experimental

3.1 Materiales, Equipos y Reactivos

Reactivos	Materiales
Solución de $CuSO_4$	Tubos de ensayo
Solución de NaOH	Cocina eléctrica
Solución de NaOH	Vaso de precipitación de 400 mL

HNO_3 concentrado	
Reactivo de Millón	Muestras
Solución de $AgNO_3$	Avena
Solución de nitrato mercúrico	Clara de huevo
Solución de nitrato de plomo	Leche
Alcohol etílico	Arveja partida

3.2 Expermentación

Prueba de Biuret

1. En un tubo de ensayo colocar 3 mL de solución muestra. Adicionar 3 gotas de una solución de $CuSO_4$ y, luego agitar.
2. Añadir 2 mL de una solución de NaOH
3. Dejar reposar la mezcla y observar.
4. Proceder de igual forma para las demás muestras.

Prueba Xantoprotéica

1. A 3 mL de una solución muestra añadir 1 ml de HNO_3 concentrado; luego, agregar, cuidadosamente, gota a gota una solución de NaOH hasta que el líquido quede alcalino.
2. Dejar reposar y observar.
3. Repetir el mismo procedimiento para las demás muestras.

Prueba de Millón

1. En un tubo de ensayo colocar 5 mL de solución muestra; luego, agregar 1 mL del reactivo de Millón.
2. Calentar a ebullición y observar.
3. Repetir el procedimiento con las demás muestras.

Prueba de precipitación

1. A 3 mL de solución muestra adicionar 8 gotas de solución de AgNO3. Observar.
2. Repetir la experiencia con nitrato mercúrico y nitrato de plomo.
3. Repetir el mismo procedimiento con las demás muestras.

Prueba de coagulación

1. Calentar en un tubo de ensayo, 5 mL de solución muestra y luego añadir 10 mL de alcohol etílico.
2. Anotar las observaciones.
3. Repetir los pasos anteriores con las demás muestras.

4. Resultados

4.1 Complete el siguiente cuadro de resultados, indicando con (+) si la prueba es positiva y con (-) si la prueba es negativa.

Muestra	Biuret	Xantoprotéica	Reactivo Millón	Precipitación	Coagulación
Arveja partida					
Clara de huevo					
Leche					
Avena					

Informe 10

Título: _____

_____

Nombre: _____

Mesa: _____ **Turno:** _____ **Fecha:** _____

Cuestionario

1. ¿Por qué el enlace peptídico responde a la prueba de Biuret ?

2. ¿Qué estructuras dentro de las proteínas son responsables de la respuesta positiva a la prueba Xantoprotéica?

3. ¿Qué es el reactivo de Millón?

4. Explique la causa por qué los aminoácidos son anfóteros.

5. Defina desnaturalización de una proteína

6. Proponga diez sustancias que desnaturalizan proteínas.

ANEXOS

Nomenclatura de compuestos orgánicos

Según el sistema IUPAC, un nombre químico tiene por lo menos tres partes principales: prefijo(s), padre y sufijo. El o los prefijos especifican el número, localización, naturaleza y orientación espacial de los sustituyentes y otros grupos funcionales de la cadena principal. El padre dice cuántos átomos de carbono hay en la cadena principal y el sufijo identifica al grupo funcional más importante presente en la molécula.

Nombre químico = Prefijo(s) - padre - sufijo

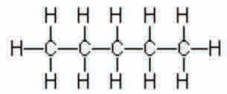
Este esquema, con algunas modificaciones, se usa para todos los compuestos orgánicos. Los principios generales son los mismos. La nomenclatura consiste en una secuencia de reglas tediosas que se aplican según un orden de prioridad ya establecido. La siguiente metodología, si se aplica paso a paso, produce resultados correctos, sin necesidad de memorizar muchas reglas.

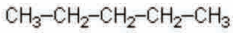
Hidrocarburos

1. Alcanos

1.1 Alcanos lineales

Los compuestos orgánicos más sencillos desde un punto de vista estructural, son los alcanos. Consisten de cadenas no ramificadas de átomos de carbono, con sus respectivos hidrógenos, unidos por enlaces simples, como se ilustran a continuación, en las tres representaciones del pentano son equivalentes.





El nombre general de estos compuestos es alcano; el sufijo es la terminación: ano. El nombre de los alcanos lineales más comunes se indica en la siguiente Tabla 1.

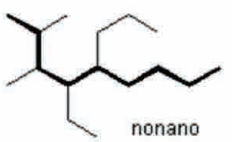
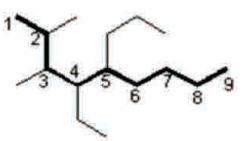
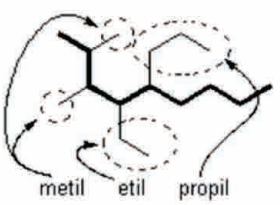
Tabla 1: Nombres de los alcanos lineales más comunes.

C_n	Nombre		C_n	Nombre		C_n	Nombre
1	Metano		7	Heptano		13	Tridecano
2	Etano		8	Octano		20	Icosano
3	Propano		9	Nonano		21	Henicosano
4	Butano		10	Decano		22	Docosano
5	Pentano		11	Undecano		23	Tricosano
6	Hexano		12	Dodecano		30	Triacontano

1.2 Alcanos ramificados no cíclicos

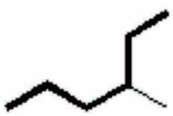
En nombre de los alcanos complejos o ramificados se basa en el principio de que estos compuestos se consideran derivados de la cadena carbonada más larga presente en el compuesto. De esta forma, el nombre padre es el correspondiente al del alcano lineal de igual número de carbonos. Las ramificaciones o sustituyentes de la cadena principal se designan con prefijos adecuados y sus posiciones se especifican por medio de números relativos a la cadena màs larga.

Para escribir el nombre de alcanos ramificados, se sigue un procedimiento basado en una serie de reglas secuenciales, las cuales se ilustrarán brevemente con el siguiente compuesto y, más en detalle, en las siguientes secciones.

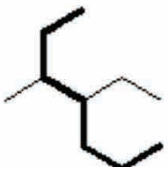
A. Encuentre la cadena principal en el compuesto. En este caso, nueve carbonos: nona*no*. Sección 1	 nonano
B. Numere la cadena principal desde un extremo al otro, de tal forma que se asigne el número más pequeño posible al "primer punto de diferencia". Sección 2	 2,3,4,5 y no 5,6,7,8
C. Nombre cada sustituyente o ramificación diferentes en la cadena principal. Nombre los sustituyentes que sean iguales una sola vez. En este caso: metil, etil, propil. Sección 3	 metil etil propil
D. Alfabetice los sustituyentes. Sección 4	etil metil propil
E. Escriba el nombre completo del compuesto como una sola palabra insertando prefijos de posición, multiplicativos, etc. antes de cada sustituyente y agregando el nombre padre y sufijo al final del nombre. Sección 5	4-etil-2,3-dimetil-5-propilnonano

Sección 1: Encontrar la cadena principal

Encuentre la cadena carbonada más larga y continua y use ese nombre como el del padre. La cadena más larga puede no ser obvia en la forma en que se escribe.

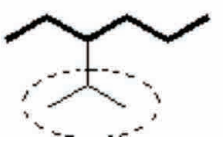


Nombrado como hexano sustituido.

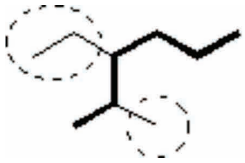


Nombrado como heptano sustituido.

Si están presentes dos cadenas diferentes de igual longitud, seleccione como padre la que tiene el mayor número de ramificaciones.



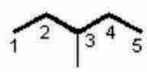
Incorrecto: hexano con un sustituyente



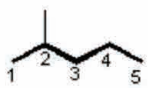
Correcto: hexano con dos sustituyentes

Sección 2: Numerar la cadena principal

Identificada la cadena principal, ésta se numera empezando desde un extremo de tal forma que se asigne el número más bajo posible al sustituyente. Por ejemplo, los siguientes dos isómeros estructurales se diferencian sólo en la posición del sustituyente CH_3. En ambos, la cadena principal es de cinco carbonos y, por lo tanto, ambos son pentanos sustituidos. En el compuesto de la izquierda, la cadena principal se puede numerar de izquierda a derecha, o de derecha a izquierda y en ambos casos el sustituyente se encuentra en el carbono 3. Pero en el compuesto de la derecha, la numeración de izquierda a derecha produce el índice 2, en tanto que la numeración de derecha a izquierda produce el índice 4. Se escoge entonces el sentido de numeración que produjo el índice más bajo: el 2.

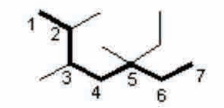


3-metilpentano

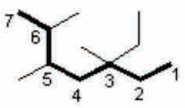


2-metilpentano

Cuando hay más de un sustituyente, la cadena principal se numera de izquierda a derecha, o de derecha a izquierda, de forma tal que se asigne el número más bajo posible *en el primer punto de diferencia* de las dos posibles secuencias. La posición de cada sustituyente queda indicada por esa numeración. Por ejemplo, para el siguiente compuesto, la cadena principal se numera como se ilustra a continuación:



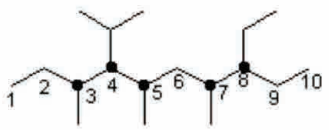
de izquierda a derecha:
2,3,5,5



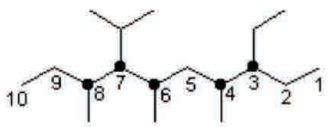
de derecha a izquierda:
3,3,5,6

La numeración en la estructura de la izquierda da como resultado los índices 2,3,5,5 para las posiciones de los sustituyentes, en tanto que la de la derecha produce 3,3,5,6. La numeración más baja en el primer punto de diferencia (en este caso en el primer índice de las dos posibles secuencias) es la numeración de la izquierda y, por esto, el nombre correcto es 5-etil-2,3,5-trimetilheptano y no 3-etil-3,5,6-trimetilheptano. Note que si hay dos sustituciones en el mismo carbono el índice se indica dos veces. Siempre debe haber un índice por cada sustituyente. Note también que no importa el nombre de los sustituyentes; la numeración queda determinada por el criterio que se acaba de exponer.

En el siguiente ejemplo, los dos sentidos de numeración producen los índices 3,4,5,7,8 y 3,4,6,7,8. Como el primer índice de cada secuencia de numeración es idéntica (un 3), se compara el segundo índice y se observa que también son iguales (un 4). Al comparar el tercer índice, se observa que son diferentes (un 5 y un 6). Este es el primer punto de diferencia y se escoge la secuencia con el menor índice (el 5). Observe que no importa el orden con que aparezcan estos índices en el nombre final (esto se explicará en la sección 5); 8-etil~etc es el nombre correcto, a pesar de que 3-etil~etc tiene un índice más bajo al inicio del nombre.



correcto (3,4,5,7,8):
8-etil-4-isopropil-3,5,7-trimetildecano

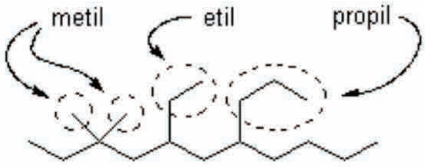


incorrecto (3,4,6,7,8):
3-etil-7-isopropil-4,6,8-trimetildecano

Sólo cuando ambos sentidos de numeración de la cadena producen secuencias de sustitución idénticas, se escoge la que proporcione el índice menor en el orden alfabético del compuesto; por ejemplo: 3-etil-7-metilnonano y no 7-etil-3-metilnonano.

Sección 3: Nombrar cada sustituyente o ramificación

Los sustituyentes de la cadena principal se identifican y se nombran de acuerdo con el nombre del alcano lineal presentado en la Tabla 1. Para ello, la terminación ano del alcano correspondiente se cambia por il. Así, en el siguiente ejemplo, los sustituyentes con 1, 2 y 3 carbonos son: metil, etil y propil. Cuando un sustituyente ocurre más de una vez en la cadena principal, este se menciona una sola vez. Así, en este caso tenemos metil, etil y propil y no metil, metil, etil y propil.

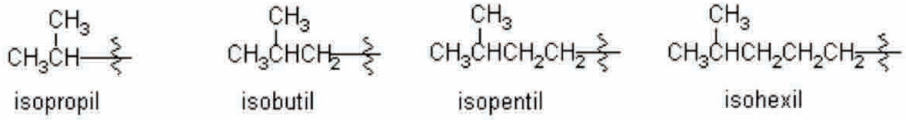


5-etil-3,3-dimetil-7-propilundecano

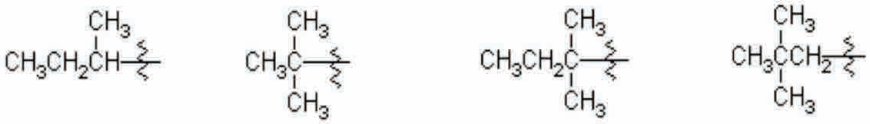
Como se verá en la sección 5, cuando hay dos o más sustituyentes iguales se utilizan los prefijos multiplicativos di, tri, tetra, penta, hexa, etc, para indicar que el sustituyente ocurre más de una vez; pero aun así, la posición de cada sustituyente se indica con índices; debe aparecer un índice separado con comas por cada sustituyente. Los prefijos di, tri, etc. no se separan con guiones de los sustituyentes que modifican: dimetil es correcto; di-metil es incorrecto.

2,2-dimetilpentano (no 2-dimetilpentano) | 2-metilpentano (no 4-metilpentano) | 2,3-dimetilpentano (no 3,4-dimetilpentano) | 2,2,4-trimetilpentano (no 2,4,4-trimetilpentano)

Algunos otros sustituyentes comunes tienen nombres especiales:

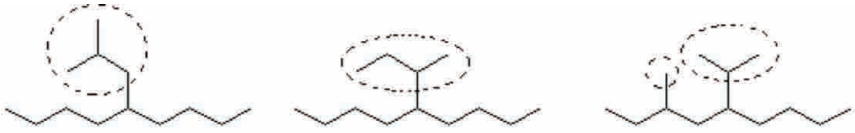


isopropil | isobutil | isopentil | isohexil



sec-butil | *ter*-butil | *ter*-pentil | neopentil

por ejemplo

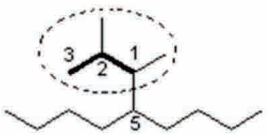


5-isobutilnonano | 5-*sec*-butilnonano | 5-isopropil-3-metilnonano

Sustituyentes más complejos, cuyas estructuras no corresponden con las de alcanos lineales o con los casos comunes anteriores, se nombran como derivados de la cadena carbonada más larga del sustituyente, empezando por el átomo de carbono enlazado a la cadena principal, el cual siempre recibe el índice uno. El nombre completo del sustituyente (que debe terminar en il) se encierra entre paréntesis en el nombre final del compuesto,

para indicar que se trata de un sustituyente complejo.

En el primer ejemplo, que se muestra a continuación, el sustituyente complejo está encerrado en un óvalo punteado. El punto de unión a la cadena principal recibe por convención el índice 1. La cadena más larga a partir del punto de unión es de tres carbonos y se indica con enlaces más oscuros. Por lo tanto, el sustituyente es un propano sustituido por dos grupos metilo en las posiciones 1 y 2. El sustituyente se llama entonces 1,2-dimetilpropil. Usar el nombre 1,2-dimetilpropano como sustituyente es incorrecto.



5-(1,2-dimetilpropil) nonano

6-(1,2,2-trimetilbutil) dodecano

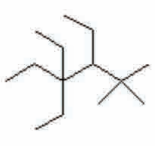
3-etil-2,8-dimetil-7-propildecano (ver sección 1)

Sección 4: Alfabetizar los sustituyentes

Los sustituyentes se ordenan alfabéticamente. Por convención, en los nombres comunes que se vieron en la sección anterior que tienen un prefijo separado por guión (s*ec- y ter-*), se ignora ese prefijo a la hora de alfabetizar. Por ejemplo, el sustituyente sec-butil se alfabetiza en la letra b. Los demás, que no tienen un guión, se toman como una sola palabra. Por ejemplo, isopropil se alfabetiza en la letra i. Note que aún no se ha mencionado los prefijos multiplicativos di, tri, etc. Ellos no tienen nada que ver con el orden alfabético de los sustituyentes y se verán en la siguiente sección.

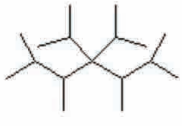
Sustituyentes en orden alfabético:

etil metil



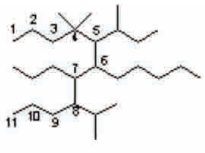
3,4,4-trietil-2,2-dimetilhexano

isopropil metil



4,4-diisopropil-2,3,5,6-tetrametilheptano

sec-butil isopropil metil pentil propil



5-*sec*-butil-8-isopropil-4,4-dimetil-6-pentil-7-propilundecano

El nombre de sustituyentes complejos se considera como una sola unidad, tal como lo indican los paréntesis que lo deben encerrar. Por ejemplo, se considera que el sustituyente (1,2-dimetilpropil) empieza con la letra d.

Las reglas de la IUPAC permiten citar los grupos o ramificaciones no sólo en orden alfabético, sino también en orden de complejidad ascendente. El orden alfabético es el más aceptado y también el usado por el Chemical Abstracts.

Sección 5: Escribir el nombre completo del compuesto

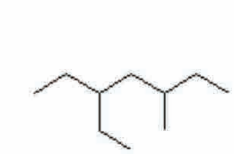
Como último paso, se insertan en el nombre final del compuesto los índices numéricos correspondientes a cada sustituyente. El nombre completo del compuesto se escribe como una sola palabra, sin espacios, separando entre sí los índices de numeración con comas; y separando los índices de los nombres de los sustituyentes con guiones. El último sustituyente no se separa del nombre padre con un guión. Así, por ejemplo, un nombre correcto es 5-metilpentano y uno incorrecto es 5-metil-pentano.

Cuando existan dos o más sustituyentes iguales en la cadena principal, se insertan prefijos multiplicativos di, tri, tetra, penta, hexa, hepta, octa, nona, deca, etc. antes del nombre del sustituyente para indicar el número de esos sustituyentes. No se deben usar guiones.

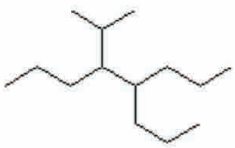
Por ejemplo, la aplicación de los pasos anteriores al siguiente compuesto produce:

Encontrar la cadena principal:	octano
Numerar la cadena:	2,2,4
Nombrar sustituyentes:	metil sec-butil
Alfabetizar sustituyentes	Sec-butil metil
Insertar índices y prefijos (Escribir nombre completo):	4-sec-butil-2,2-dimetiloctano

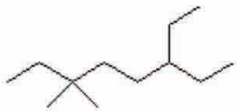
Observe con cuidado los siguientes ejemplos:



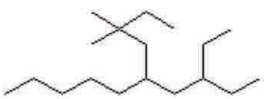
3-etil-5-metilheptano
(no 5-etil-3-metilheptano)



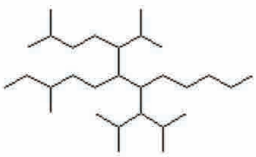
4-isopropil-5-propiloctano
(no 4-propil-5-isopropiloctano)



6-etil-3,3-dimetiloctano
(no 3-etil-6,6-dimetiloctano
ni 3,3-dimetil-6-etiloctano)

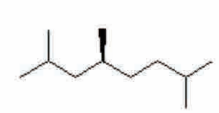


5-(2-etilbutil)-3,3-dimetildecano
[no 5-(2,2-dimetilbutil)-3-etildecano]

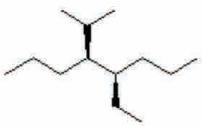


2-metil-5-(1-metiletil)-7-(2-metil-1-(1-metiletil)propil)-
6-(3-metilpentil)dodecano

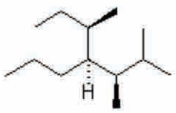
La quiralidad de los carbonos se especifica con los prefijos *R- y S-* de acuerdo con las reglas de Cahn-Ingold-Prelog. Cuando sólo hay un carbono quiral no es necesario anteponer un índice numérico a la designación R- o S-. Cuando hay más de un carbono quiral, cada designación debe llevar su índice de posición y los índices se repiten normalmente como prefijos de cada sustituyente. Por ejemplo, un nombre correcto es (3R,4S)-3,4-dimetilheptano y uno incorrecto es (3R,4S)-dimetilheptano. Las designaciones de quiralidad se separan entre sí con comas, se encierran en paréntesis y se escriben al principio del nombre separando el paréntesis del resto del nombre con un guión.



(*S*)-2,4,7-trimetiloctano
(no 2,5,7-trimetil-octano)



(4*R*,5*S*)-4-etil-5-isopropiloctano
(no 4-isopropil-5-etiloctano
ni 4*R*-etil-5*S*-isopropiloctano)



(3*R*,4*S*,5*R*)-2,3,5-trimetil-
4-propilheptano
(no 4-*sec*-butil-2,3-dimetilheptano)

En los ejemplos anteriores, se hizo uso de cuñas para indicar enlaces que están orientados hacia el lector, en tanto que enlaces dibujados normalmente se supone que están en el plano del papel y los dibujados con puntos se orientan hacia atrás del papel. La orientación de algún enlace que no esté explícitamente indicado se deduce de la geometría que deben tener los carbonos sp^3. Así, en el primer ejemplo, el hidrógeno del carbono quiral debe estar orientado hacia atrás, pues ese carbono ya tiene un enlace hacia adelante y dos en el plano del papel.

2 Halogenuros de alquilo

En la nomenclatura común, los nombres de estos compuestos son similares a los de sales inorgánicas. Esta nomenclatura aún se usa ampliamente.

cloruro de *n*-hexilo

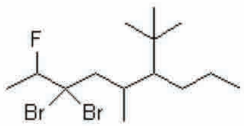
bromuro de isopropilo

yoduro de *sec*-butilo

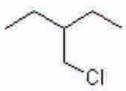
Aunque desde el punto de vista químico, los halogenuros de alquilo son diferentes a los alcanos, para propósitos de nomenclatura son prácticamente iguales. Cada átomo de halógeno se nombra con los prefijos fluoro, cloro, bromo y yodo y se trata como si fuera otro sustituyente alquilo. Así, por ejemplo, un nombre correcto es 4-cloro-3-metilheptano y no 4-cloro-5-metilpentano. Al asignar índices numéricos, los halógenos no tienen ninguna prioridad sobre los demás sustituyentes alquílicos de la cadena principal.

En español el nombre correcto es yodo, en tanto que en inglés es iodo. Esto puede producir nombres diferentes en ambos idiomas. Para dar nombre a estos compuestos se utiliza el procedimiento ya descrito para alcanos.

1-bromo-4-clorobutano



3,3-dibromo-6- *t*-butil-2-fluoro-5-metilnonano

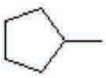


3-(clorometil)pentano

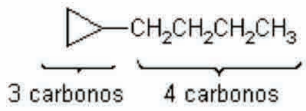
3. Cicloalcanos

3.1 Seleccionar la cadena principal del compuesto

Los compuestos cíclicos normalmente se nombran como cicloalcanos sustituidos por grupos alquilo y no com alcanos sustituidos por ciclos. La única excepción a esta regla ocurre cuando la cadena alquílica contiene un número mayor de carbonos que el anillo. En estos casos, el anillo se considera un sustituyente del alcano de cadena abierta y se nombra utilizando el prefijo ciclo.



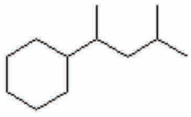
metilciclopentano



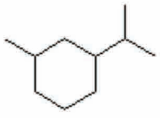
1-ciclopropilbutano

Cuando el anillo tiene sólo un sustituyente no es necesario indicar su posición. Por ejemplo, metilciclopentano no necesita escribirse como 1-metilciclopentano. Pero si hay dos o más sustituyentes, cada uno debe tener su posición indicada.

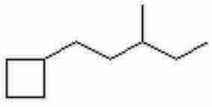
etilciclopentano



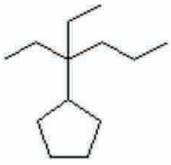
(1,3-dimetilbutil)ciclohexano
o 2-ciclohexil-4-metilpentano



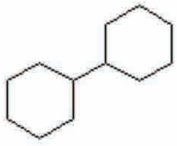
1-isopropil-3-metilciclohexano



1-ciclobutil-3-metilpentano



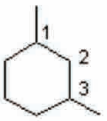
3-ciclopentil-3-etilhexano



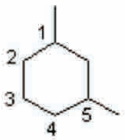
ciclohexilciclohexano

3.2 Numerar los sustituyentes del ciclo

Los sustituyentes del ciclo se numeran de tal forma que se obtengan los índices más bajos en el primer punto de diferencia, tal y como se hizo para los alcanos.



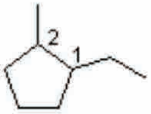
Correcto: 1,3-dimetilciclohexano



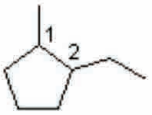
Incorrecto: 1,5-dimetilciclohexano

Cuando existan dos sentidos de numeración del anillo que produzcan secuencias de sustitución idénticas, se escoge la que proporcione el primer índice menor en el nombre final del compuesto; es decir, ya con los sustituyentes en orden alfabético.

Ejemplo:



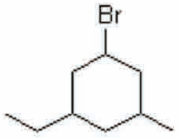
Correcto: 1-etil-2-metilciclopentano



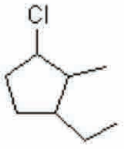
Incorrecto: 2-etil-1-metilciclopentano

3.3 Alfabetizar sustituyentes y escribir el nombre completo

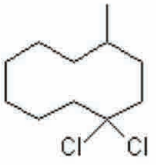
Dos o más grupos alquilo se citan alfabéticamente. De igual manera si hay halógenos presentes, es decir, no tienen ninguna prioridad sobre ellos.



1-bromo-3-etil-5-metilciclohexano

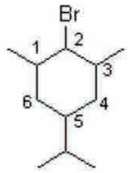


1-cloro-3-etil-2-metilciclopentano

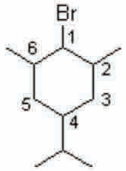


1,1-dicloro-4-metil-ciclodecano

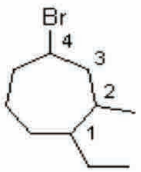
De acuerdo con la prioridad de las reglas, *primero* se escoge la numeración más baja posible y *luego* ésta se aplica a los sustituyentes ordenados alfabéticamente. Así, en el siguiente ejemplo, la numeración correcta es 1,2,3,5 y el nombre es 2-bromo-5-isopropil-1,3-dimetilciclohexano. El nombre alterno 1-bromo-4-isopropil-2,6-dimetilciclohexano es incorrecto, pues se origina de la numeración 1,2,4,6, la cuál es más alta que la primera en el tercer dígito. No importa el hecho que el primer nombre completo empiece con 2- y el segundo con 1-; éste último sigue siendo incorrecto. Un error común es asignar una mayor prioridad (índices más bajos) a los halógenos que a los grupos alquilo.



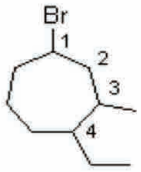
Correcto: (1,2,3,5)
2-bromo-5-isopropil-1,3-dimetilciclohexano



Incorrecto: (1,2,4,6)
1-bromo-4-isopropil-2,6-dimetilciclohexano

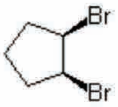


Correcto: (1,2,4)
4-bromo-1-etil-2-metilcicloheptano

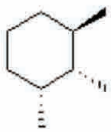


Incorrecto: (1,3,4)
1-bromo-4-etil-3-metilcicloheptano

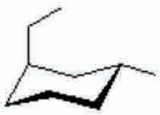
La isomería geométrica se puede indica anteponiendo los prefijos *cis- o trans-* al nombre del compuesto.



cis-1,2-dibromociclopentano



cis,trans-1,2,3-trimetilciclohexano

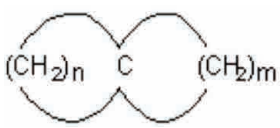


(1*R*, 3*R*)-1-etil-3-metilciclohexano
o *trans*-1-etil-3-metilciclohexano

4. Alcanos policíclicos

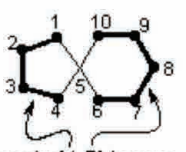
4.1 Espiro compuestos

Son compuestos bicíclicos con un átomo de carbono común a ambos anillos. La nomenclatura se basa en el siguiente esquema:



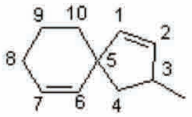
espiro[n.m]alcano

La numeración empieza por el ciclo más pequeño, siendo el carbono 1 el que está vecino al carbono común. Se usa como prefijo la palabra espiro seguida de paréntesis rectangulares; dentro de ellos, se coloca el número de carbonos a ambos lados del carbono común, primero el menor, separados por un punto. Obsérvese que no es el número de carbonos de cada anillo. A continuación se escribe el nombre padre del compuesto; es decir, el correspondiente al número total de carbonos de los dos anillos.



espiro[4.5]decano

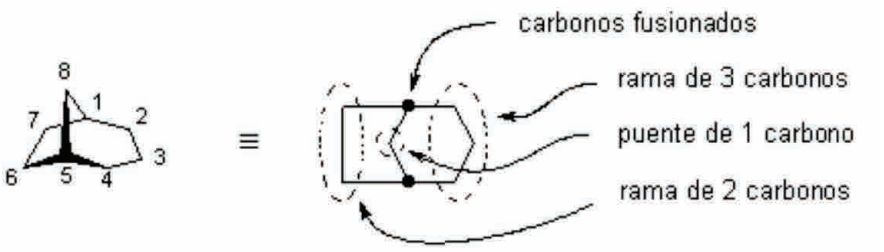
espiro[3.3]heptano



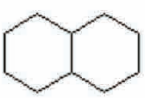
3-metilespiro[4.5]deca-1,6-dieno

4.2 Biciclos

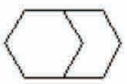
Son compuestos que tienen dos átomos de carbono comunes a tres ciclos. El nombre padre de estos compuestos es el del compuesto de cadena abierta correspondiente al número total de carbonos del compuesto cíclico. Se usa el prefijo biciclo, para indicar los dos ciclos. Se numera empezando por uno de los carbonos comunes (en puente), continuando por el anillo más largo y, luego, con los otros anillos en orden descendiente hasta el más pequeño de último. La longitud de los puentes se indica entre paréntesis cuadrados, empezando por el más largo.



biciclo[3.2.1]octano

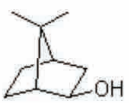


biciclo[4.4.0]decano

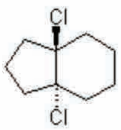


biciclo[3.3.1]nonano

biciclo[2.1.1]hexano



7,7-dimetilbiciclo[2.2.1]heptan-2-ol



trans-1,6-diclorobiciclo[4.3.0]nonano

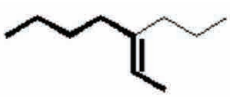
biciclo[3.2.1]oct-1-eno

5. Alquenos

5.1 Nombrar al hidrocarburo padre

La cadena principal es la cadena más larga que contiene al doble enlace. La terminación

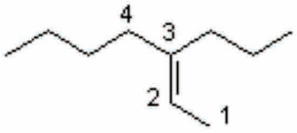
ano del alcano correspondiente se cambia por eno, para indicar la presencia del doble enlace.

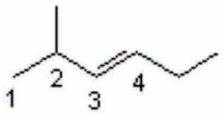


Nombrado como un hepteno y no como un octeno, ya que el doble enlace no está contenido completamente en la cadena de ocho carbonos.

5.2 Numerar los átomos de la cadena

Se empieza por el extremo más cercano al doble enlace. Si el doble enlace es equidistante de los dos extremos, se empieza por el extremo más cercano al primer punto de ramificación. Esta regla asegura que los carbonos del doble enlace reciban los números más bajos posibles.

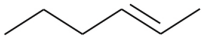




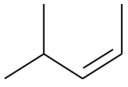
5.3 Escribir el nombre completo

Ordene los sustituyentes en orden alfabético e inserte índices numéricos y prefijos como se ha hecho anteriormente. Para indicar la posición del doble enlace en la cadena, se escribe un índice justo antes del nombre padre del compuesto; por ejemplo 2-penteno. Este índice debe ser el menor de los dos correspondientes a los carbonos del doble enlace.

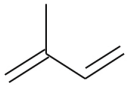
Si hay más de un doble enlace, se inica la posición de cada uno y se usa los sufijos dieno, trieno, tetraeno, etc. Cuando exista la posibilidad de isomería geométrica, se indica el isómero del que se trata utilizando los prefijos *cis-, trans-,* (E)- o (Z)-.



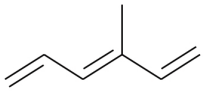
2-hexeno



4-metil-2-penteno

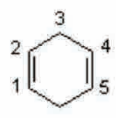


2-metil-1,3-butadieno

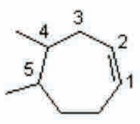


3-metil-1,3,5-hexatrieno

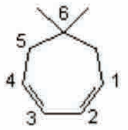
Los cicloalquenos se nombran de forma tal que el doble enlace reciba los índices 1 y 2 y que el primer punto de ramificación reciba el valor más bajo posible. Cuando sólo hay un doble enlace, no es necesario especificar su posición, pues se entiende que está en el carbono 1.



1,4-ciclohexadieno



4,5-dimetilciclohepteno

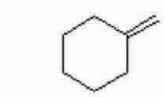


6,6-dimetil-1,3-cicloheptadieno

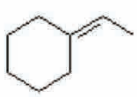
Existen algunos sustituyentes insaturados cuyos nombres comunes son aceptados por la IUPAC:

	H_2C–	$H_2C{=}CH$–	$CH_3CH{=}$	$H_2C{=}CH{-}CH_2$–
Común:		Vinil		Alil
IUPAC:	metilen	etenil	etiliden	2- propenil

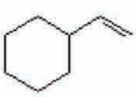
Su uso se ilustra a continuación.



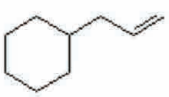
metilenciclohexano



etilidenciclohexano



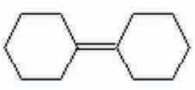
vinilciclohexano
o etenilciclohexano



alilciclohexano
o (2-propenil)ciclohexano

cloruro de vinilo

bromuro de alilo

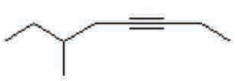


ciclohexilidenciclohexano

6. Alquinos

Los alquinos siguen las mismas reglas generales de nomenclatura de los hidrocarburos ya discutidas. Para nombrar un alquino, el sufijo ano es sustituido por ino. La posición del triple enlace se indica con su número en la cadena. La numeración empieza por el extremo de la cadena más cercano al triple enlace.

Los compuestos que contienen enlaces dobles y triples se llaman alqueninos (y no alquinenos). En este caso, la cadena se empieza a numerar desde el extremo más cercano al primer enlace múltiple, ya sea doble o triple. Sin embargo, cuando son posibles dos formas alternas de numeración, se escoge la que asigne a los enlaces dobles números más bajos que a los triples; por ejemplo, 1-hepten-6-ino.



6-metil-3-octino

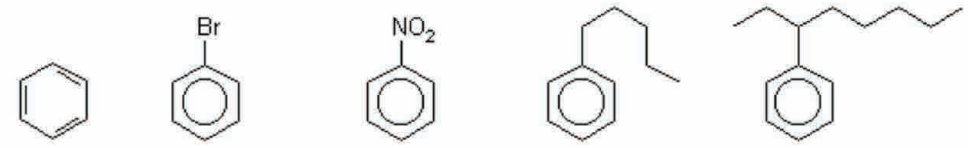
1-hepten-6-ino

trans-4-metil-7-nonen-1-ino

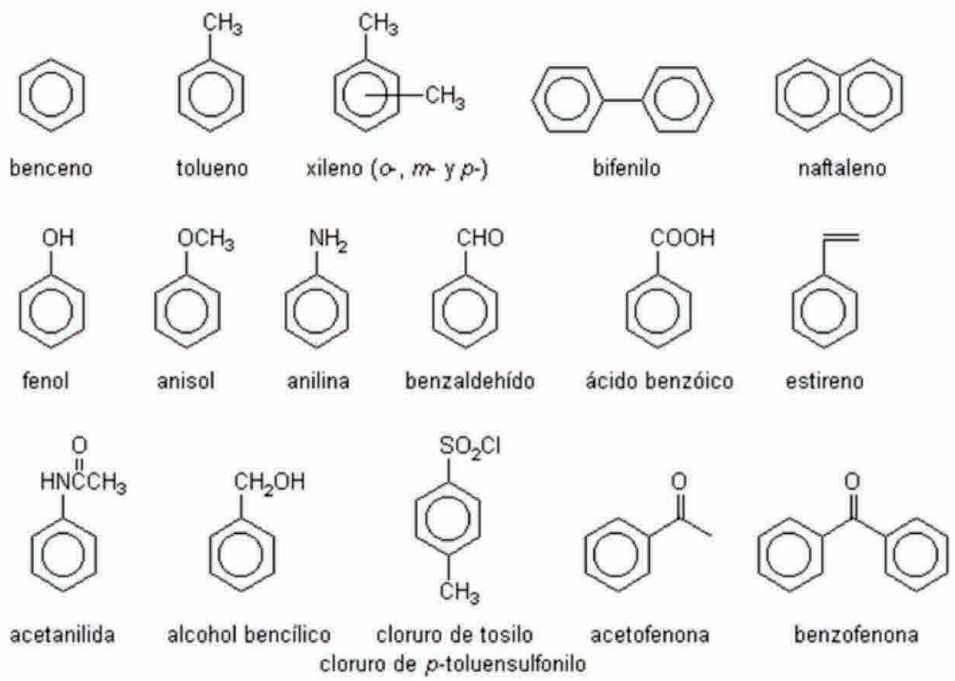
7. Compuestos aromáticos

Los derivados monosustituidos del benceno se nombran de la misma forma que otros hidrocarburos, pero usando benceno como nombre padre. Bencenos sustituidos por grupos

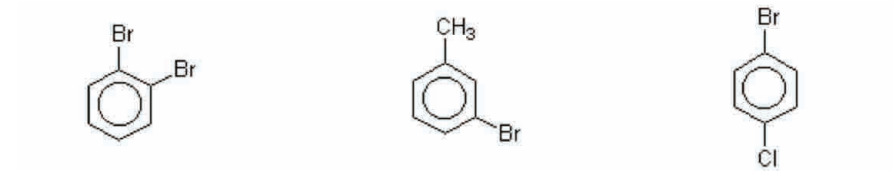
alquilo se nombran de dos formas diferentes dependiendo del tamaño del grupo alquilo. Si el sustituyente es pequeño (seis átomos de carbono o menos), el compuesto se nombra como un benceno sustituido por el grupo alquilo, por ejemplo, etilbenceno. Si el sustituyente tiene más de 6 carbonos, el compuesto se nombra como un alquilo sustituido por el benceno, por ejemplo, 2-fenildecano. Cuando el benceno se considera un sustituyente, se utiliza el nombre *fenil* en el nombre del compuesto.



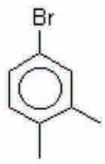
Existen muchos compuestos con nombres comunes que son aceptados por la IUPAC:



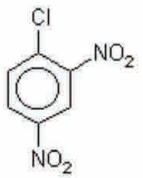
Bencenos disustituidos se nombran utilizando los prefijos *orto-, meta- y para-* o simplemente *o-, m- y p-* como se ilustra a continuación:



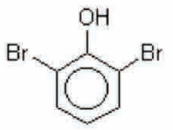
Bencenos con más de dos sustituyentes se nombran numerando la posición de cada sustituyente del anillo. La numeración se hace de tal forma que resulten los números más bajos posibles. Los sustituyentes se listan alfabéticamente en el nombre del compuesto. También se puede usar como nombre padre del compuesto el nombre común de un benceno monosustituido (tolueno, fenol, anilina, etc.). En este caso, el sustituyente principal es el que le da el nombre característico al compuesto; como -OH para el fenol y -NH_2 para la anilina, y siempre reciben el índice 1. Los nombres como bromobenceno y nitrobenceno (terminados en benceno) no se pueden usar de esta manera.



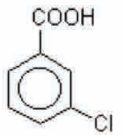
4-bromo-1,2-dimetil-benceno



1-cloro-2,4-dinitrobenceno



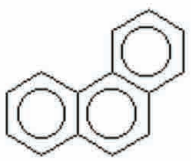
2,6-dibromofenol



ácido *m*-clorobenzóico

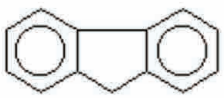
Algunos compuestos aromáticos policíclicos con nombres comunes son:

antraceno



fenantreno

indeno



fluoreno

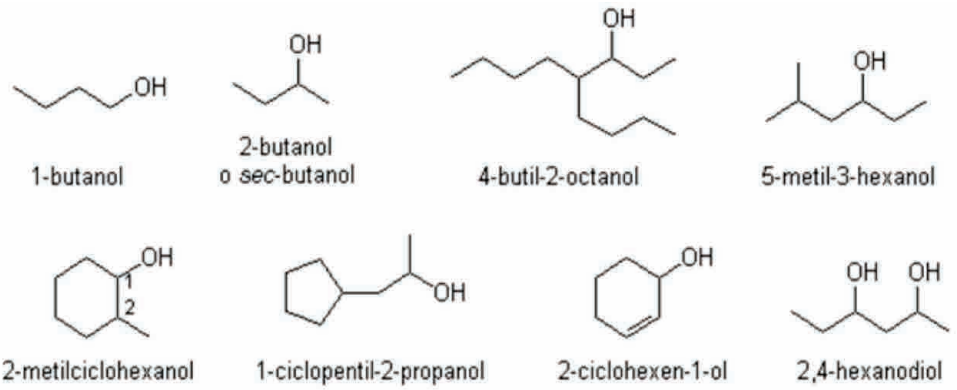
Compuestos oxigenados

Se nombran siguiendo el procedimiento descrito para alcanos. La cadena principal debe contener al grupo funcional y éste determina el sufijo del compuesto. La cadena principal se debe numerar de forma tal que el grupo (o grupos) funcional reciba el índice más bajo posible.

En las siguientes secciones se describirán las características propias a cada grupo.

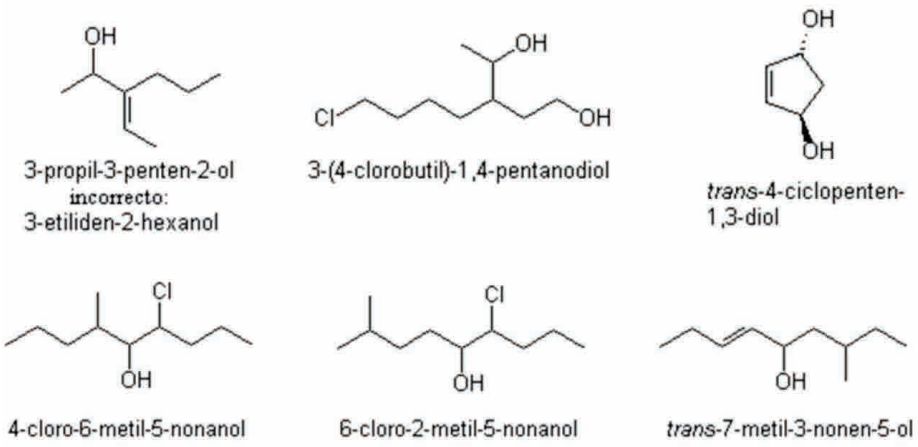
1. Alcoholes

La cadena principal del compuesto debe contener al grupo OH enlazado a un átomo de carbono, al que se le asigna el índice más bajo posible. La terminación o del alcano correspondiente a la cadena principal se sustituye por ol, para indicar que se trata de un alcohol. De forma análoga a los alquenos, se antepone un prefijo al nombre padre para especificar la posición del grupo funcional, en este caso el OH.



Cuando existe más de un mismo grupo funcional (por ejemplo dos hidroxilos) se utilizan los prefijos di, tri, etc. antes de la terminación propia al grupo, por ejemplo diol, triol, etc. Además, la cadena principal debe tener el máximo número de ese grupo funcional.

En un alqueno, como el 2-hexeno, o en un alcohol saturado como el 2-hexanol, el índice 2 indica la posición del doble enlace y del hidroxilo respectivamente. Cuando hay un doble enlace carbono-carbono y otro grupo funcional (oxhidrilo, carbonilo, amino, etc.), el índice correspondiente a la posición del grupo funcional se inserta justo antes del sufijo y el del alqueno se inserta como normalmente se hace. De esta forma, el nombre 4-hexen-2-ol indica una cadena de 6 carbonos con enlace doble entre el carbono 4 y el 5 y un grupo OH en el carbono 2. La cadena principal es ahora aquella que contenga al grupo funcional y al máximo número de enlaces dobles y triples. En el siguiente ejemplo, la cadena principal no es la más larga (6 carbonos), sino la que tiene al doble enlace (5 carbonos).

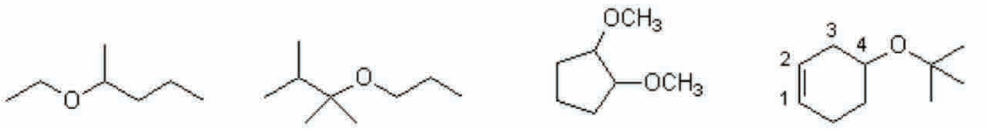


2. Éeres

Existen dos maneras de nombrar a estos compuestos. Los éteres simples se nombran mencionando los grupos orgánicos que los constituyen y anteponiendo la palabra éter.

éter dietílico éter isopropil vinílico

Compuestos que contienen más de un grupo *oxi* u otros grupos funcionales se nombran como derivados de un compuesto padre con sustituyentes alcoxi. El grupo alquilo más largo se escoge como padre.

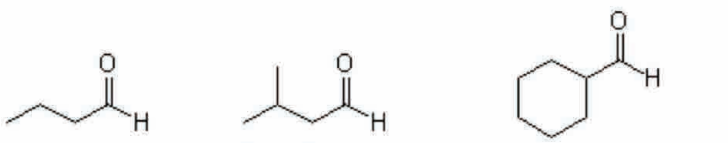


2-etoxipentano 2,3-dimetil-2-propoxibutano 1,2-dimetoxi-ciclopentano 4-*t*-butoxi-1-ciclohexeno

Los éteres cíclicos son compuestos heterocíclicos cuya nomenclatura no se considera en este apartado.

3. Aldehídos

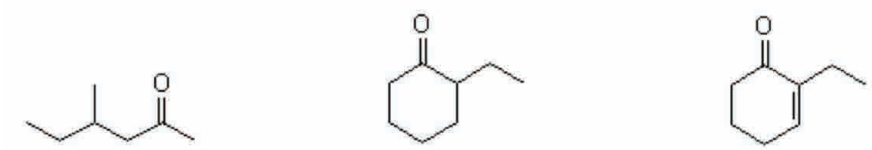
Los nombres de los aldehídos se derivan del nombre del alcano con el mismo número de átomos de carbono. La o final del alcano se reemplaza por al. El grupo funcional formilo (-CHO) siempre está al final de la cadena, razón por la cual no es necesario especificar su posición en el nombre, pero su presencia sí determina la numeración de la cadena. Aldehídos más complejos, con el grupo -CHO enlazado a un anillo utilizan el sufijo carbaldehído en lugar de al.



butanal 3-metilbutanal ciclohexanocarbaldehído

4. Cetonas

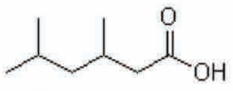
Se remplaza la terminación o de la cadena principal con ona. Se numera la cadena de forma tal que se asigne al carbonilo el índice más bajo posible y se indica esta posición en el nombre del compuesto.



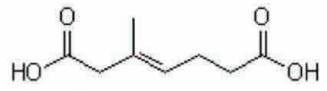
4-metil-2-hexanona 2-etilciclohexanona 2-etil-2-ciclohexen-1-ona

5. Ácidos carboxílicos

El nombre de estos compuestos se forma anteponiendo la palabra ácido y cambiando la o final del alcano correspondiente por oico. El carbono carboxílico siempre lleva el índice 1.

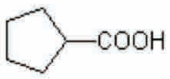


ácido 3,5-dimetilhexanoico

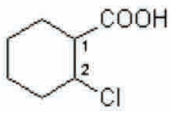


ácido (*E*)-3-metil-4-heptenodioico

Para compuestos con el grupo -COOH enlazado a un ciclo se usa el sufijo carboxílico. El carbono al que está enlazado el carboxilo lleva el índice 1 y el carbono carbonílico no se numera en este sistema.

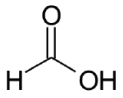


ácido ciclopentanocarboxílico

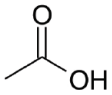


ácido 2-clorociclohexanocarboxílico

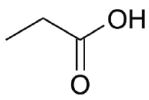
Existe una gran cantidad de ácidos con nombres comunes que aún son ampliamente usados. Los más comunes son los ácidos fórmico, acético, benzoico.



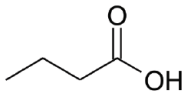
ácido metanoico
ácido fórmico



ácido etanoico
ácido acético



ácido propanoico
ácido propiónico

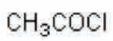


ácido butanoico
ácido butírico

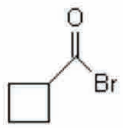
Derivados de ácidos carboxílicos

1. Haluros de acilo

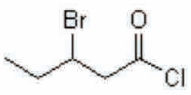
Estos compuestos llevan nombre al estilo de sales inorgánicas. El nombre del grupo acilo se deriva del ácido carboxílico reemplazando la terminación ico por ilo o la terminación carboxílico por carbonilo.



cloruro de acetilo



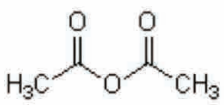
bromuro de ciclobutanocarbonilo



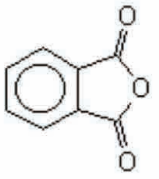
cloruro de 3-bromopentanoilo

2. Anhídridos

Los anhídridos simétricos de ácidos carboxílicos de cadena recta y los anhídridos cíclicos de ácidos dicarboxílicos se nombran cambiando la palabra ácido por anhídrido.

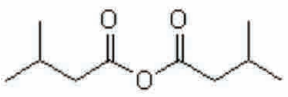


anhídrido acético

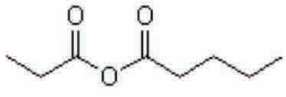


anhídrido ftálico

Si el anhídrido se deriva de un ácido sustituido, se utiliza el prefijo bis en el nombre. Anhídridos asimétricos se nombran anteponiendo la palabra anhídrido al nombre de los dos ácidos.



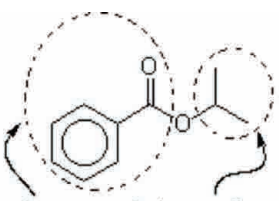
anhídrido bis(3-metilbutanoico)



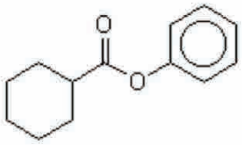
anhídrido pentanoico propanoico

3. Ésteres

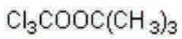
Los ésteres reciben nombres como si fueran sales inorgánicas. La terminación ico del ácido correspondiente se cambia a *ato* y, luego, se menciona el grupo alcohoxilo con la terminación *ilo* separando las dos palabras con la palabra de.



benzoato de isopropilo



ciclohexanocarboxilato de fenilo

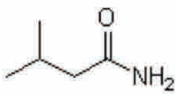


tricloroacetato de *tert*-butilo

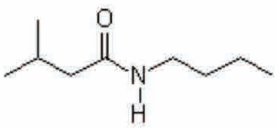
Compuestos nitrogenados

1. Amidas

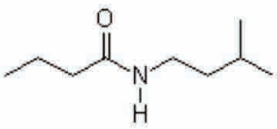
Las amidas se nombran a partir del ácido que les da origen, eliminando la palabra ácido y cambiando la terminación oico o ico por amida o la terminación carboxílico por carboxamida. Si la amida tiene sustituyentes alquílicos en el átomo de nitrógeno, se indica su posición con el prefijo *N*-.



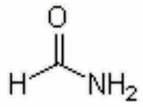
3-metilbutanamida



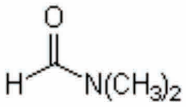
N-butil-3-metilbutanamida



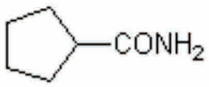
N-(3-metilbutil)butanamida



formamida



N,N-dimetilformamida

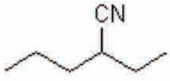


ciclopentanocarboxamida

2. Nitrilos

Para nombrar a estos compuestos, se escoge la cadena más larga que incluya el carbono del grupo -CN, y al nombre del alcano correspondiente se la agrega el sufijo nitrilo. El carbono número 1 es el carbono del grupo C≡N

pentanonitrilo

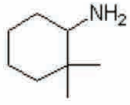


2-etilpentanonitrilo

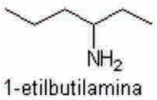
3. Aminas

Las aminas primarias simples se nombran agregando el sufijo amina al nombre del sustituyente alquílico (metil, etil, etc.).

pentilamina



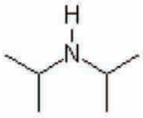
2,2-dimetilciclohexilamina



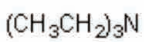
1-etilbutilamina

2-metil-1,4-butanodiamina

Las aminas secundarias y terciarias simétricas se nombran agregando los prefijos di y tri al nombre del grupo alquilo.

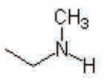


diisopropilamina

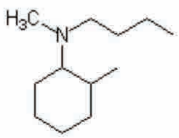


trietilamina

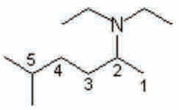
Las aminas asimétricas se nombran como aminas primarias *N*-sustituidas. Se escoge el grupo alquilo más largo como padre y los otros grupos alquilo se consideran sustituciones en el átomo de nitrógeno, lo que se indican con el prefijo *N*-.



N-metiletilamina



N-butil-2,*N*-dimetilciclohexilamina



N,*N*-dietil-5-metil-2-hexilamina

Compuestos polifuncionales

Para nombrar compuestos que tienen más de un grupo funcional, se escoge el grupo con mayor prioridad de acuerdo con la Tabla 2. Los compuestos de mayor prioridad son los ácidos carboxílicos (RCOOH) seguidos por sus derivados (RCOX). Luego siguen aldehídos y cetonas (C=O), alcoholes, fenoles y aminas (R-OH, Ar-NH_2) y, al último, alquenos y alquinos (C=C, C≡C). El sufijo del nombre del compuesto corresponde al del grupo funcional de mayor prioridad; los demás grupos se citan como sustituyentes (prefijos). La cadena principal es la más larga que contenga a ese grupo funcional y se numera de forma tal que el grupo funcional principal reciba el índice más bajo posible. Si el grupo funcional principal ocurre más de una vez, la cadena principal es la que contiene el mayor número de ocurrencias de ese grupo.

Tabla 2: Prioridad de grupos funcionales principales.

La prioridad más elevada se encuentra en la parte superior de la tabla.

Función	Nombre como sufijo	Nombre como prefijo
ácido carboxílico	ácido –oico ácido -carboxílico	carboxi
ácido sulfónico	ácido -sulfónico	sulfo
anhídrido	anhídrido -oico anhídrido -carboxílico	
Éster	-oato de -carboxilato de	alcoxicarbonil
halogenuro de acilo	halogenuro de -oilo halogenuro de -carbonilo	halocarbonil
Amida	-amida -carboxamida	amido
Nitrilo	-nitrilo -carbonitrilo	ciano
Aldehído	-al -carbaldehído	oxo
Cetona	-ona	oxo
Alcohol	-ol	hidroxi

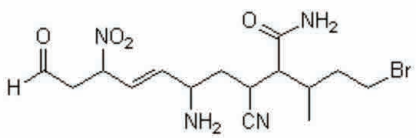
Fenol	-ol	hidroxi
Tiol	-tiol	mercapto
amina	-amina	amino
imina	-imina	imino
alqueno	-eno	alquenil
alquino	-ino	alquinil
alcano	-ano	alquil

Algunos grupos funcionales pueden ser citados sólo como prefijos, son los grupos subordinados que se indican en la Tabla 3 y ninguno de ellos tiene prioridad alguna.

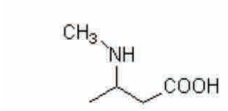
Tabla 3: Grupos funcionales subordinados

Función	Nombre como prefijo
Éter	alcoxi
halogenuro	halo (cloro, bromo, etc.)
Nitro	nitro
sulfuro	alquiltio
azida	azido
diazo	diazo

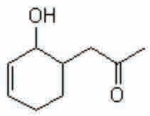
En el siguiente ejemplo, el grupo funcional de mayor prioridad corresponde a la amida, por lo que es usado como prefijo y dará nombre al compuesto. Como la cadena carbonada más larga que pasa por ese grupo es de 10 átomos de carbono, el compuesto es una decanamida; pero, como también hay un doble enlace carbono-carbono en la cadena, se debe llamar decenamida. A continuación se numera la cadena de tal forma que el grupo amida reciba el índice más bajo. Finalmente, se indican todos los demás grupos funcionales (en orden alfabético) como sustituyentes, utilizando sus nombres como prefijos del nombre padre del compuesto. El nombre final de este ejemplo es: trans-5-amino-2-(3-bromo-1-metilpropil)-3-ciano-8-nitro-10-oxo-6-decenamida.



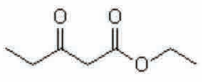
Otros ejemplos



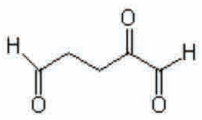
ácido 3-(metilamino)butanóico



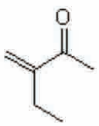
1-(2-hidroxi-3-ciclohexenil)-2-propanona



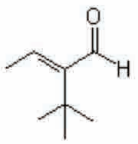
3-oxopentanoato de etilo



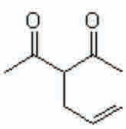
2-oxopentanodial



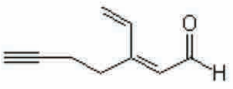
3-etil-3-buten-2-ona



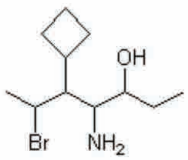
(*E*)-2-*t*-butil-2-butenal



3-alil-2,4-pentanodiona



3-vinil-2-hepten-6-inal

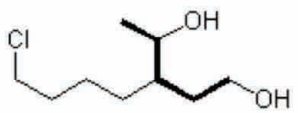


4-amino-6-bromo-5-ciclobutil-3-heptanol

Cuando en un compuesto acíclico existe más de una cadena que puede ser escogida como principal, la IUPAC establece una serie de criterios que se aplican sucesivamente hasta que se alcance una decisión. Algunos de estos criterios, en su orden de prioridad, son:

1. Máximo número de sustituyentes correspondiendo al grupo principal.

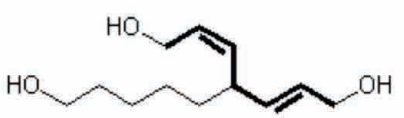
Aunque en este caso la cadena más larga es de 7 carbonos, se escogió como cadena principal la de 5 carbonos, pues ella contiene a los dos grupos hidroxilos principales. El átomo de cloro, o cualquier otro grupo funcional de menor prioridad no tiene influencia al escoger la cadena.



3-(4-clorobutil)-1,4-pentanodiol

2. Máximo número de enlaces dobles y triples considerados juntos.

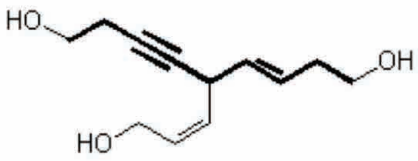
En este caso, todas las cadenas posibles tienen dos grupos hidroxilo. La cadena más larga contiene 9 carbonos y un doble enlace. La cadena que se indica con líneas más gruesas contiene sólo 7 carbonos, pero además tiene dos dobles enlaces, por lo que se debe escoger como la cadena principal.



4-(5-hidroxipentil)-2,5-heptadien-1,7-diol

3. Longitud máxima.

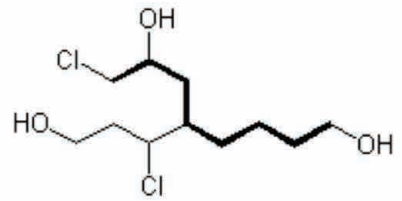
Si todas las posibles cadenas contienen igual número del grupos funcionales de mayor prioridad y de dobles y triples enlaces carbono-carbono, simplemente se escoge como principal la más larga. La presencia de otros grupos funcionales no tiene ninguna importancia. Si todas las posibilidades tienen igual longitud, se continúa con las reglas siguientes para hacer la elección.



5-(3-hidroxipropenil)-3-nonen-6-in-1,9-diol

4. Indices más bajos para los grupos principales (para el sufijo)

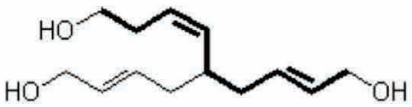
Aquí, el nombre alterno (~1,8-octanodiol) tiene en el segundo índice un número más alto que en el caso de ~1,7-octanodiol.



8-cloro-5-(1-cloro-3-hidroxipropil)-1,7-octanodiol

5. Indices más bajos para los enlaces múltiples.

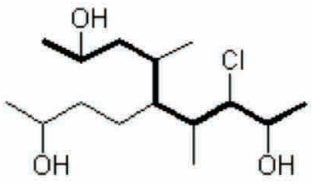
Compare ~2,7-nonadien~ con ~2,6-nonadien~.



5-(4-hidroxi-2-butenil)-2,6-nonadien-1,9-diol

6. Máximo número de sustituyentes citados como prefijos.

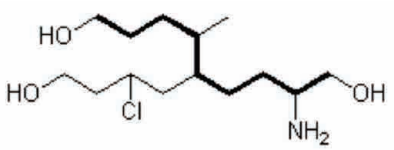
En este ejemplo, todas las cadenas posibles tienen igual número de grupos funcionales principales (-OH) y de átomos de carbono. Sin embargo, una de ellas tiene sólo un grupo que se cita como sustituyente (como prefijo), otra tiene 2 y la que se señala tiene 3, por lo que se escoge como cadena principal. No tiene importancia el tipo de sustituyentes de que se trate; pueden ser alquilos, halógenos, aminos, hidroxilos, nitrilos, etc. Todos son simples sustituyentes que se indican como prefijos en el nombre del compuesto.



3-cloro-5-(3-hidroxibutil)-4,6-dimetil-2,8-nonanodiol

7. Indices más bajos para todos los sustituyentes de la cadena principal citados como prefijos.

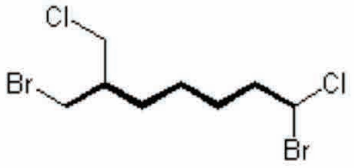
Aquí, las tres cadenas posibles cumplen con todas las reglas anteriores. Al numerar las cadenas, los índices son 3,5,6 para una; 2,5,7 para otra; y 2,5,6 para la que se indica.



2-amino-5-(3-cloro-4-hidroxibutil)-6-metil-1,9-nonanodiol

8. El sustituyente que se cite de primero en orden alfabético.

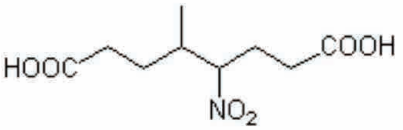
Si la regla anterior falla y se tienen índices iguales para dos o más cadenas, el orden alfabético de los sustituyentes es el que decide la cadena principal. En este hidrocarburo, ambas cadenas tienen iguales índices (1,1,6,7), por lo que el orden alfabético de los sustituyentes es el que decide. Recuerde que prefijos como di y tri no se toman en cuenta. El nombre alterno; 1,7-dicloro~ no es correcto.



1,7-dibromo-1-cloro-6-(clorometil)heptano

9. Indices más bajos para los sustituyentes citados de primero en orden alfabético.

Finalmente, si la cadena principal ya ha sido escogida, pero produce los mismos índices al numerarse de izquierda a derecha o en sentido contrario, se utiliza la numeración que le asigne un índice más bajo al sustituyente que aparezca primero en el orden alfabético. En este caso, ambos sentidos de numeración dan los índices 4,5 pero como metil aparece antes que nitro, se le asigna a metil el índice más bajo.

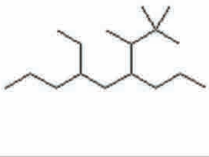
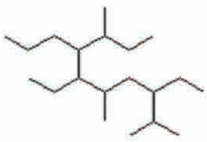
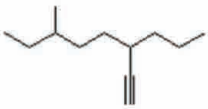
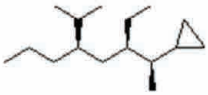
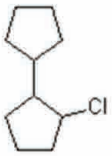
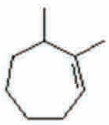
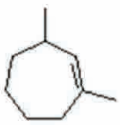
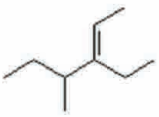
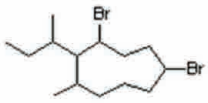
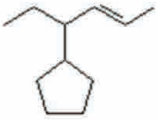
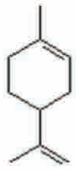
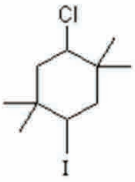
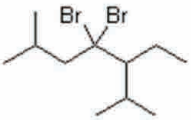
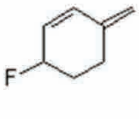


ácido 4-metil-5-nitrooctanodioico

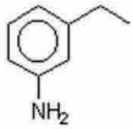
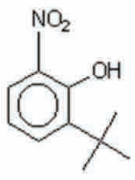
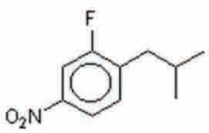
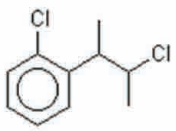
Problemas

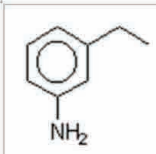
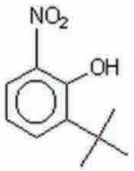
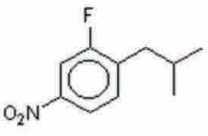
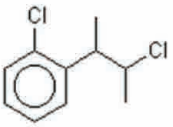
Escribir el nombre de los compuestos que se muestran en los problemas 1-52

1. Hidrocarburos y halogenuros

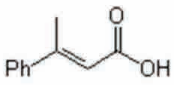
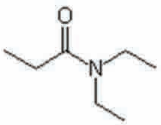
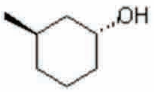
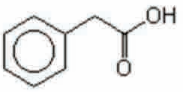
			
Problema 1	**Problema 2**	**Problema 3**	**Problema 4**
			
Problema 5	**Problema 6**	**Problema 7**	**Problema 8**
			
Problema 9	**Problema 10**	**Problema 11**	**Problema 12**
			
Problema 13	**Problema 14**	**Problema 15**	**Problema 16**

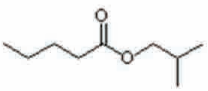
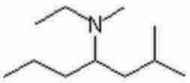
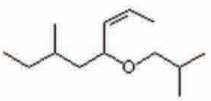
2. Compuestos aromáticos

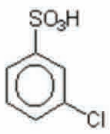
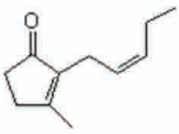
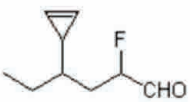
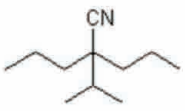
			
Problema 17	**Problema 18**	**Problema 19**	**Problema 20**

			
Problema 17	**Problema 18**	**Problema 19**	**Problema 20**

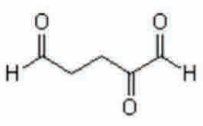
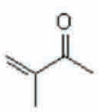
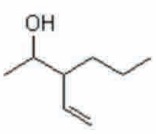
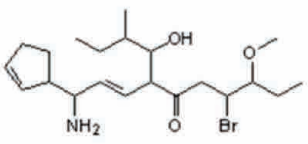
3. Compuestos monofuncionales

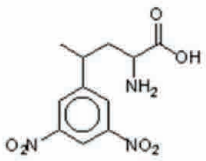
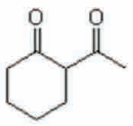
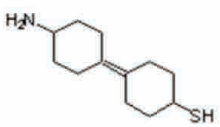
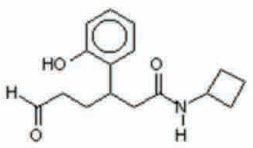
			
Problema 25	**Problema 26**	**Problema 27**	**Problema 28**

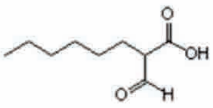
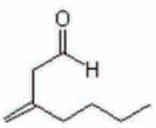
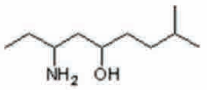
			
Problema 29	**Problema 30**	**Problema 31**	**Problema 32**

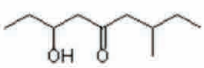
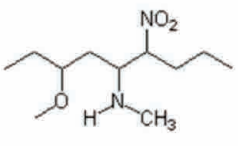
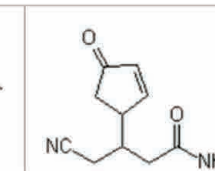
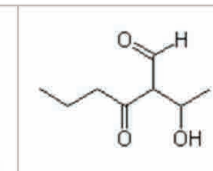
			
Problema 33	**Problema 34**	**Problema 35**	**Problema 36**

4. Compuestos polifuncionales

			
Problema 37	**Problema 38**	**Problema 39**	**Problema 40**

			
Problema 41	**Problema 42**	**Problema 43**	**Problema 44**

			
Problema 45	**Problema 46**	**Problema 47**	**Problema 48**

			
Problema 49	**Problema 50**	**Problema 51**	**Problema 52**

Respuestas a los problemas

Problema	1	6-etil-2,2,3-trimetil-4-propilnonano
Problema	2	3,6-dietil-2,5,8-trimetil-7-propildecano
Problema	3	6-metil-3-propiloctino
Problema	4	(2*R*,3*R*,5*R*)-2-ciclopropil-3-etil-5-isopropiloctano
Problema	5	1-ciclopentil-2-clorociclopentano
Problema	6	1,7-dimetilcicloheptено
Problema	7	1,3-dimetilcicloheptено
Problema	8	(*E*)-3-etil-4-metil-2-hexeno
Problema	9	*cis*-1-*sec*-butil-3-clorociclohexano
Problema	10	(3*E*,5*Z*,7*E*)-3,5,7-decatrien-1,9-diino
Problema	11	3,6-dibromo-2-*sec*-butil-1-metilciclononano
Problema	12	*trans*-4-ciclopentil-2-hexeno
Problema	13	4-isopropenil-1-metilciclohexeno (limoneno)
Problema	14	2-cloro-1,1,4,4-tetrametil-5-yodociclohexano
Problema	15	4,4-dibromo-3-etil-2,6-dimetilheptano
Problema	16	3-fluoro-6-metilenciclohexeno
Problema	17	*m*-etilanilina
Problema	18	2-*t*-butil-6-nitrofenol

Problema	19	2-fluoro-1-isobutil-4-nitrobenceno
Problema	20	1-cloro-2-(2-cloro-1-metilpropil)benceno
Problema	21	(*Z*)-3-fenil-2,5-dimetil-3-hepteno
Problema	22	*o*-vinilanisol
Problema	23	1-(2-ciclopentenil)-3-(3-clorofenil)-4-metilhexano
Problema	24	2-metil-5-(1-metil-2-metilenpropil)benzaldehído
Problema	25	ácido (*E*)-3-fenil-2-butenoico
Problema	26	*N*,*N*-dietilpropanamida
Problema	27	*trans*-3-metilciclohexanol
Problema	28	ácido fenilacético
Problema	29	pentanoato de 2-metilpropilo
Problema	30	cloruro de 4-bromobutanoílo
Problema	31	*N*-etil-2,*N*-dimetil-4-heptanamina
Problema	32	*cis*-6-metil-4-(2-metilpropoxi)-2-octeno
Problema	33	ácido *m*-clorosulfónico
Problema	34	3-metil-2-(*Z*-2-pentenil)-2-ciclopenten-1-ona (jasmona)

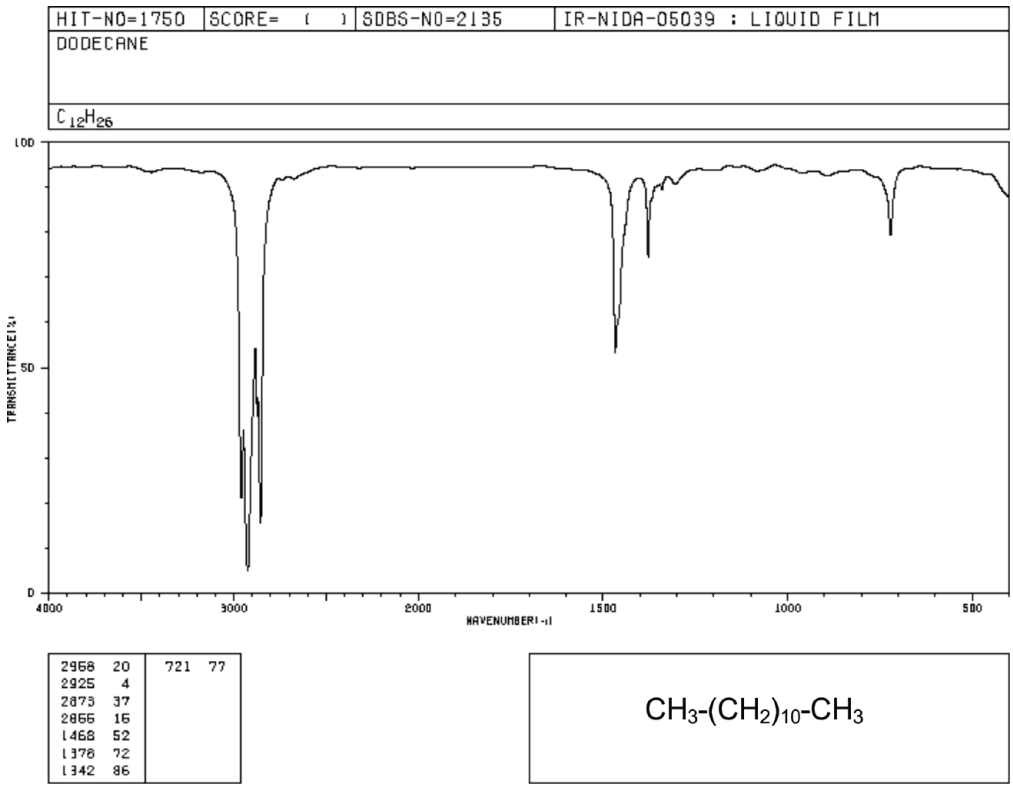
Problema	35	4-(2-ciclopropenil)-2-fluorohexanal
Problema	36	2-isopropil-2-propilpentanonitrilo
Problema	37	2-oxopentanodial
Problema	38	3-metil-3-buten-2-ona
Problema	39	3-propil-4-penten-2-ol
Problema	40	*trans*-1-amino-7-bromo-1-(2-ciclopentenil)-4-(1-hidroxi-2-metilbutil)-8-metoxi-2-decen-5-ona
Problema	41	ácido 2-amino-4-(3,5-dinitrofenil)pentanoico
Problema	42	2-(1-oxoetil)ciclohexanona
Problema	43	4-(4-aminociclohexiliden)ciclohexanotiol
Problema	44	*N*-ciclobutil-3-(2-hidroxifenil)-6-oxohexanamida
Problema	45	ácido 2-hexil-3-oxopropanóico
Problema	46	3-butil-3-butenal
Problema	47	*trans*-8-cloro-4-deceno-2,9-diol
Problema	48	7-amino-2-metil-5-nonanol
Problema	49	3-hidroxi-7-metil-5-nonanona
Problema	50	*N*-metil-3-metoxi-6-nitro-5-nonanamina
Problema	51	3-(4-oxo-2-ciclopentenil)-4-cianobutanamida
Problema	52	2-(1-hidroxietil)-3-oxohexanal

Bandas de absorción IR de funciones orgánicas más comunes

Alcanos normales (lineales)

En todos los alcanos normales y ramificados se espera encontrar sólo estiramientos y deformaciones de enlaces como los C_{sp3} -H y C_{sp3}-C_{sp3}.

Examine el espectro adjunto del dodecano $C_{12}H_{26}$ que es un alcano lineal:



Vibraciones de estiramiento C_{SP3}-H

Aparecen entre los 3000 y 2840 cm^{-1}. Son muy estables.

En los grupos metilo, estos pueden mostrar estiramientos asimétricos de los enlaces C-H entre los 2962 cm^{-1} y simétricos en los 2872 cm^{-1} (Figura 1). Por regla general, los modos simétricos siempre tienen menor energía que los asimétricos.

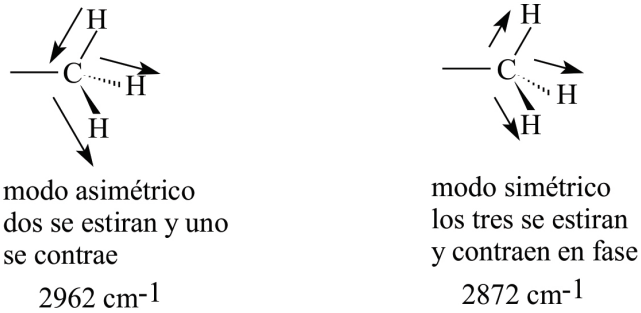


Figura 2 Estiramientos simétricos y asimétricos del $-CH_3$

Grupos metilenos acíclicos y cíclicos En estos grupos, aparecen las vibraciones C-H en el mismo rango de frecuencias que los C-H metílicos, es decir, entre los 3000 y los 2840 cm^{-1}. Pueden ser asimétricos (2926 cm^{-1}) y simétricos (2853 cm^{-1}) ver las (Figura 2).

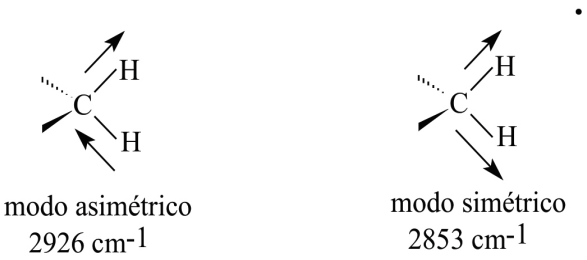


Figura 2 Estiramientos asimétrico y simétrico del $-CH_2$

Vibraciones C_{SP3}-H de deformación
Todas estas vibraciones aparecen por debajo de los 1500 cm^{-1}. No son útiles en los análisis de los espectros.

Grupo metilo En este grupo las vibraciones aparecen alrededor de 1450 cm^{-1} para la vibración asimétrica y 1375 cm^{-1} para la simétrica (Figura 3):

Figura 3 Deformaciones asimétricas y simétricas del $-CH_3$

Grupos metileno

En los grupos CH_2 o metilenos, hay vibraciones en el plano (Figura 4) y fuera del plano de la página (Figura 5). El signo positivo significa sobre el plano y el negativo bajo el plano.

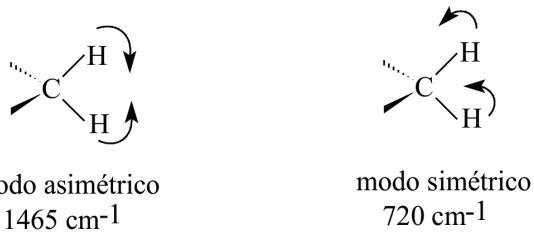


Figura 4 Deformaciones asimétricas y simétricas del $–CH_2-$ en el plano

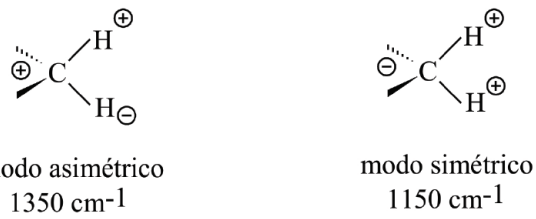


Figura 5 Deformaciones asimétricas y simétricas del $–CH_2-$ fuera del plano

Alcanos ramificados

Las frecuencias de estiramiento y deformación C_{sp3}-H en los metilos y metilenos de alcanos como los que se muestran en la Figura 6, ocurren por debajo de los 1500 cm^{-1}

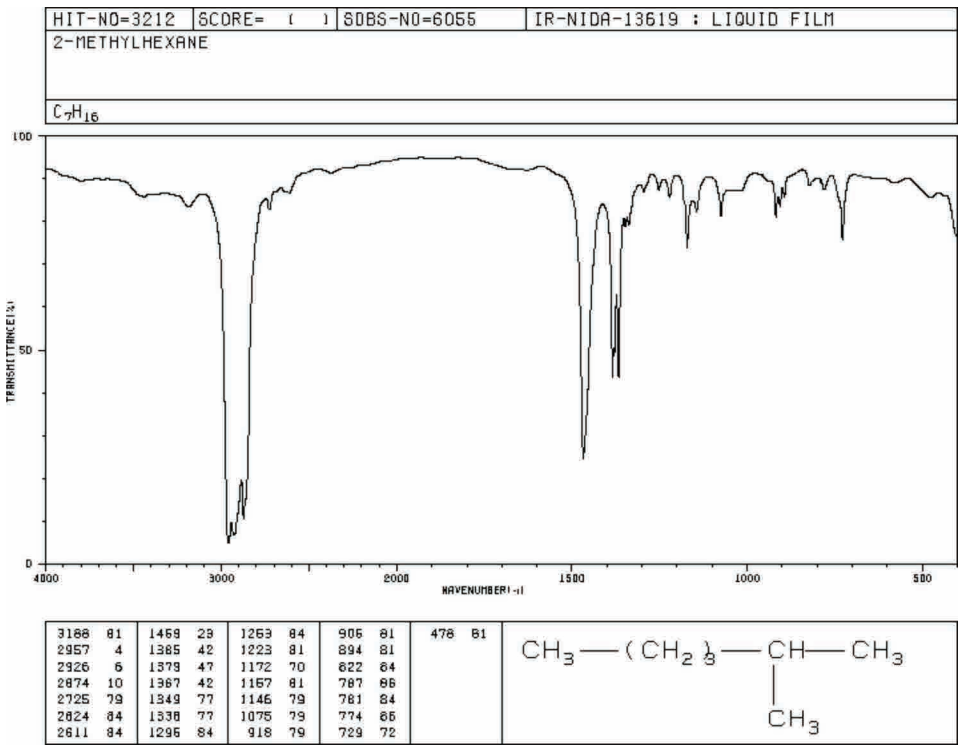
Figura Nº 6

Vibraciones C_{sp3}-H de estiramiento

Esta es la banda de estiramiento C-H del grupo metilo; se manifiesta en aproximadamente los 2890 cm^{-1}. Es muy débil y no alcanza a ser observada.

Vibraciones C_{sp3}-H de deformación.

En el gem-dimetil o isopropil, aparecen dos bandas muy juntas y muy agudas y de igual intensidad. Una de ellas a 1385 - 1380 cm^{-1} y la otra a 1370 - 1365 cm^{-1}; su apariencia es la de un tenedor de dos dientes (espectro del 2-metilhexano).



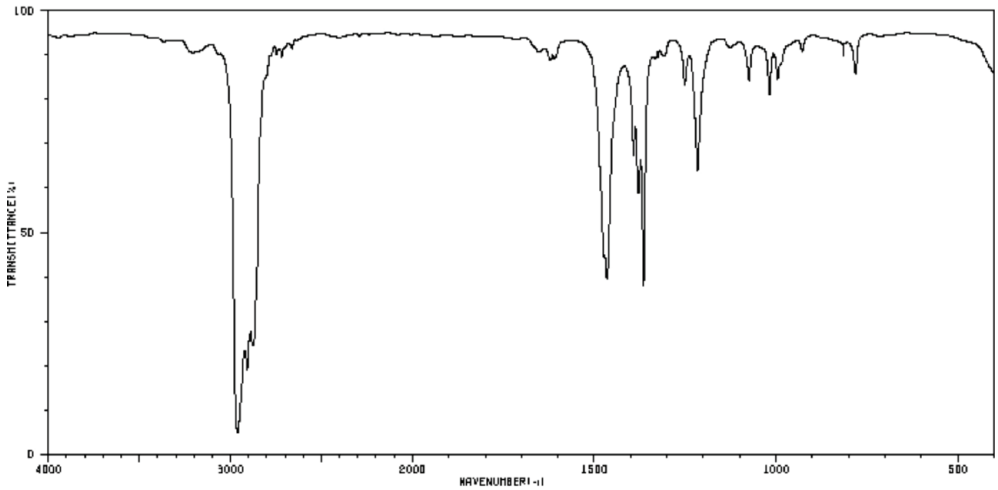
En el ter-butil aparecen también dos bandas pero de diferente intensidad. Una mediana a 1395-1385 cm^{-1} y la otra muy intensa a 1370 cm-1. Cuando ambos grupos (iso y ter) están presentes en la molécula, es difícil distinguirlas porque se superponen en la misma región de frecuencias. Vea más abajo el espectro del 2,2-dimetilbutano.

Cuando la ramificación sobre la cadena principal de la molécula está en otra posición, no aparece la señal bifurcada que se observaba por debajo de los 1500 cm^{-1} en los espectros de especies químicas con estructura iso o tert. Ver el espectro del 4-metiloctano y examine la zona de los 1360 cm^{-1}:

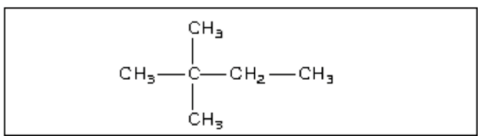
HIT-NO=1102 | SCORE= ( ) | SDBS-NO=652 | IR-NIDA-02889 : LIQUID FILM

2,2-DIMETHYLBUTANE

C_6H_{14}



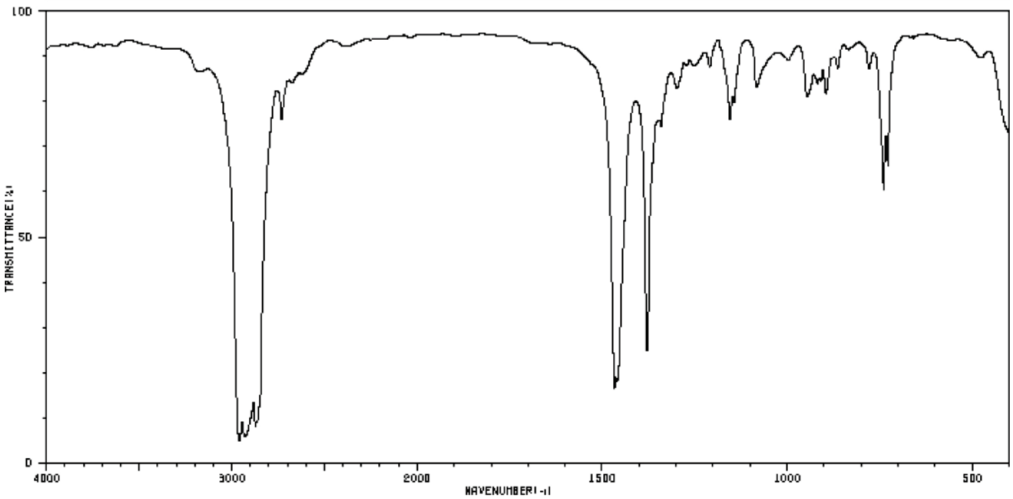
2959	4	1607	86	1306	86	814	86
2907	18	1474	43	1252	79	782	81
2881	23	1468	38	1216	82		
2871	23	1393	64	1074	81		
2718	86	1379	57	1018	79		
1821	86	1365	36	896	81		
1613	86	1323	86	986	84		



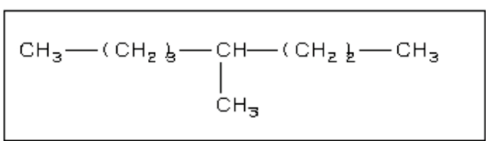
HIT-NO=3442 | SCORE= ( ) | SDBS-NO=6577 | IR-NIDA-14283 : LIQUID FILM

4-METHYLOCTANE

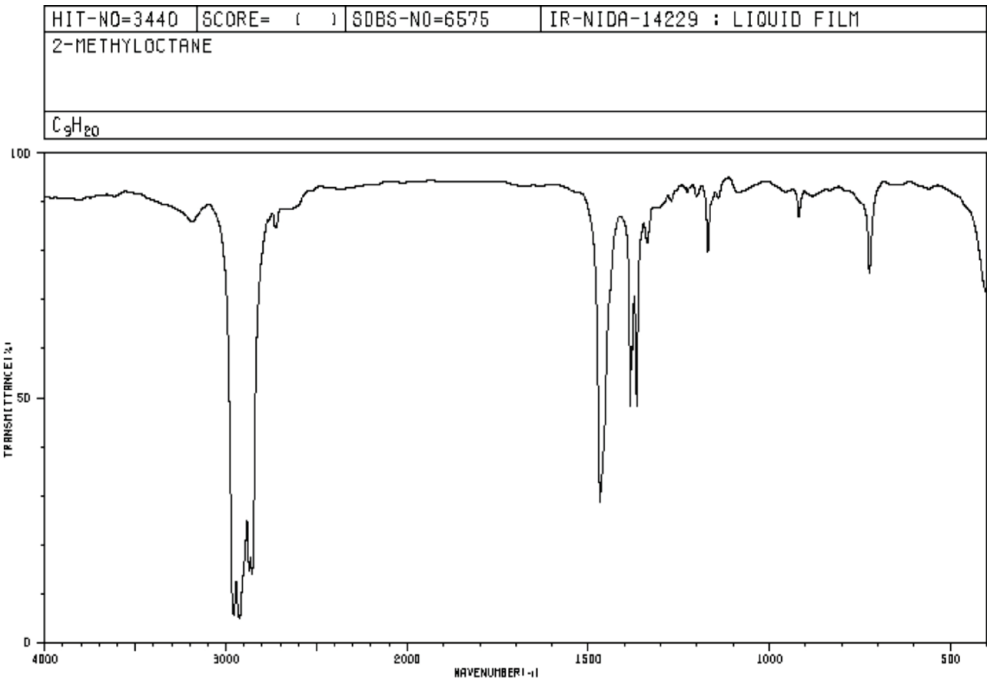
C_9H_{20}



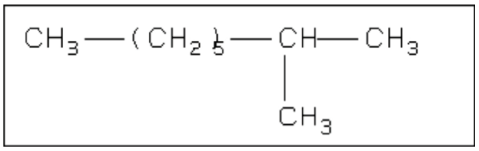
2958	4	1341	72	1000	86	778	84
2929	5	1298	79	995	86	774	86
2873	7	1250	84	947	77	740	58
2731	72	1210	84	918	81	729	64
1467	15	1155	72	909	81	476	86
1460	17	1144	77	896	79		
1379	23	1082	79	864	84		



Compare este último espectro con el del 2-metiloctano



3186	81	1468	27	724	72
2956	5	1384	46		
2925	4	1379	57		
2872	13	1367	46		
2856	13	1338	79		
2731	81	1171	77		
2721	81	919	84		

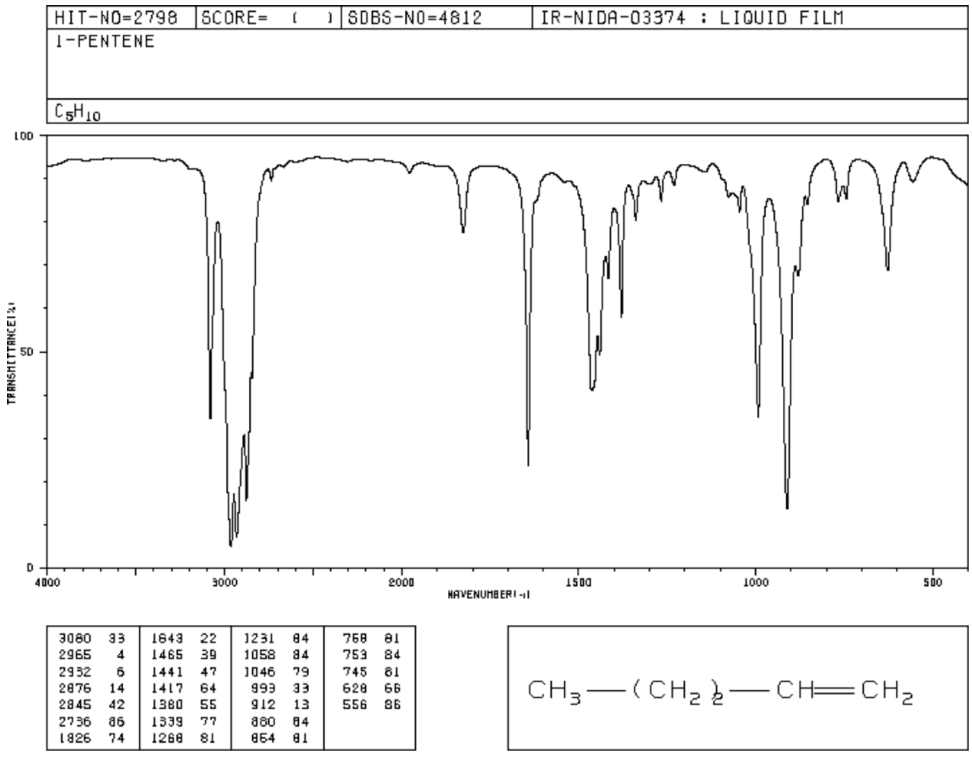


Alquenos
En un alqueno hay vibraciones de estiramiento y deformación del tipo C_{sp2}-H y C=C.

Vibraciones de estiramiento C_{sp2}-H
Estas vibraciones aparecen sobre los 3000 cm^{-1}, en alquenos, aromáticos y hetero-aromáticos.

Vibraciones de deformación C_{sp2}-H
Están entre los 1000 cm^{-1} y 650 cm^{-1}. Son las bandas más intensas en el espectro de los alquenos.

Vibración de estiramiento C=C
Esta vibración aparece a 1670-1640 cm^{-1}, es una señal aguda y de baja intensidad. Aparece en sistemas conjugados y no conjugados de dobles enlaces. Sin embargo, a veces no aparece en los alquenos trans con grupos alquilo semejantes.
Examine, como ejemplo, el espectro del 1-penteno.



El 1-penteno es un alqueno con la insaturación en el extremo de la cadena. Esta posición de la insaturación posee un aspecto característico en el espectro. Son dos bandas intensas en 1000 cm^{-1} y 909 cm^{-1}, respectivamente, que corresponden a la deformación C_{sp2} – H fuera del plano.

Los alquenos *cis* y *trans* también pueden ser distinguidos, al tener sus espectros algunos aspectos característicos. Compare los espectros del cis-3-octeno y el trans-3-hepteno:

1º El compuesto *cis* presenta una absorción pequeña y aguda en la zona de 1640 cm^{-1}, el *trans* no la presenta o apenas se muestra. Esta banda corresponde al estiramiento C=C, que aparece completamente cuando los grupos sustituyentes en el doble enlace son diferentes.

2º El compuesto trans muestra una banda fuerte en aproximadamente los 960 cm^{-1} que corresponde a la vibración de deformación RC=CR'.

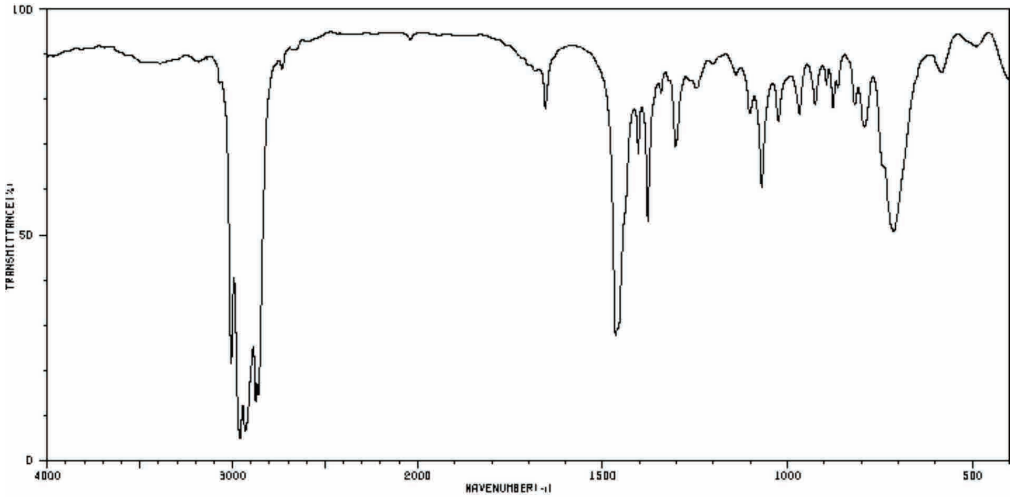
3º En cambio el compuesto *cis* presenta una absorción media pero extensa entre los 770 y 666 cm^{-1}, aproximadamente.

Todo el resto de los espectros es semejante.

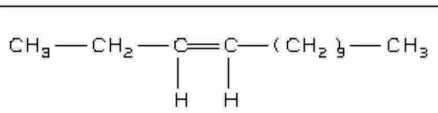
HIT-NO=929	SCORE= ( )	SDBS-NO=279	IR-NIDA-68232 : LIQUID FILM

CIS-3-OCTENE

C_8H_{16}



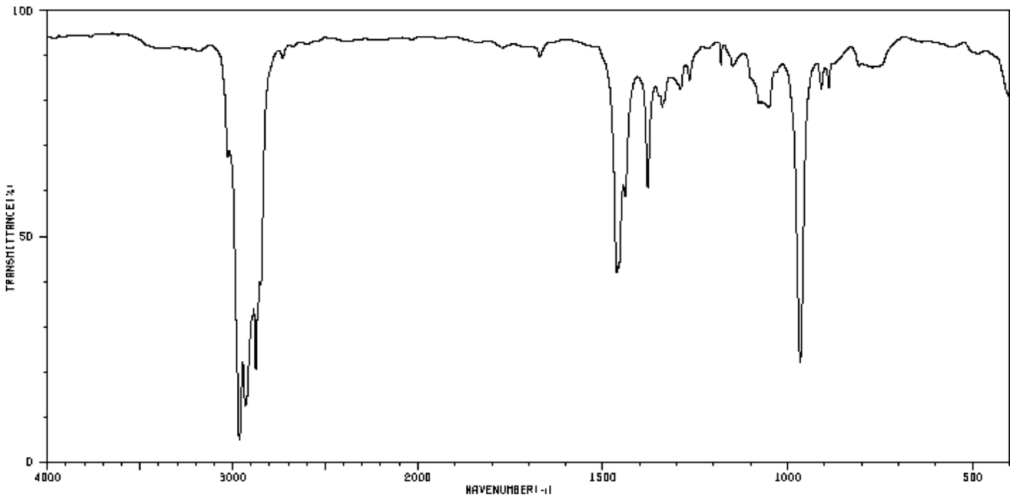
3193	84	2734	84	1304	66	925	77	585	81
3183	84	1655	74	1246	79	895	79		
3007	20	1465	26	1139	81	877	74		
2959	4	1458	28	1102	74	864	79		
2931	6	1404	66	1070	58	818	77		
2875	12	1378	50	1024	72	792	70		
2862	13	1342	79	968	74	714	49		



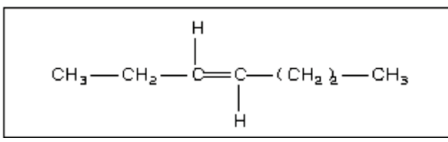
HIT-NO=3905	SCORE= ( )	SDBS-NO=8885	IR-NIDA-15862 : LIQUID FILM

TRANS-3-HEPTENE

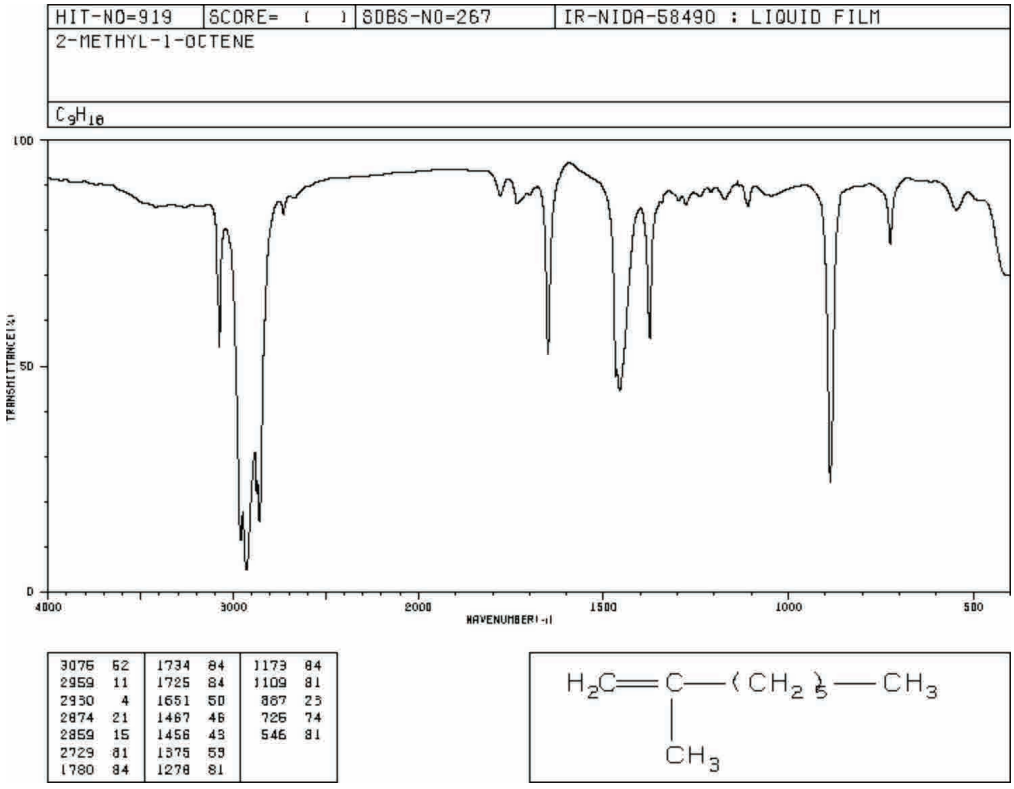
C_7H_{14}



3026	64	1467	41	1160	84
2965	4	1440	57	1068	77
2932	12	1379	58	1061	77
2876	19	1340	74	1060	74
2729	86	1290	79	966	21
1669	86	1268	61	909	79
1463	41	1181	84	889	79



Otro alqueno que presenta un espectro interesante es el gem-disustituido, como el que corresponde al 2-metil-1-octeno.



La banda característica aparece en aproximadamente 887,0 cm^{-1}

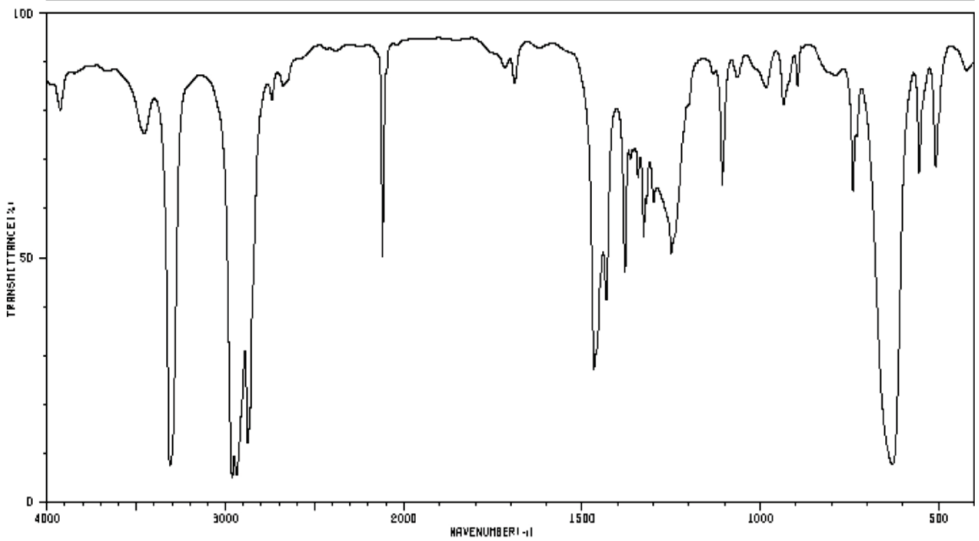
Alquinos
Aquí, debe esperarse estiramientos C_{sp}-H estiramientos C≡C, y deformaciones C_{sp}-H.

Estiramiento Csp-H
Esta banda aparece entre los 3333 y 3267 cm^{-1}. Es una banda fuerte y muy aguda, a diferencia de las que aparecen con los O-H y N-H en la misma región del espectro.

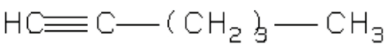
Vibración de estiramiento C≡C
Aparece como banda mediana en los 2140-2100 cm^{-1}, en los alquinos mono-sustituidos y en los 2220 cm^{-1}, en los alquinos disustituidos asimétricos.

Vibración de deformación C_{sp}-H
Aparece como una banda fuerte y ancha entre los 700 y 600 cm^{-1} (ver el espectro del 1-hexino).

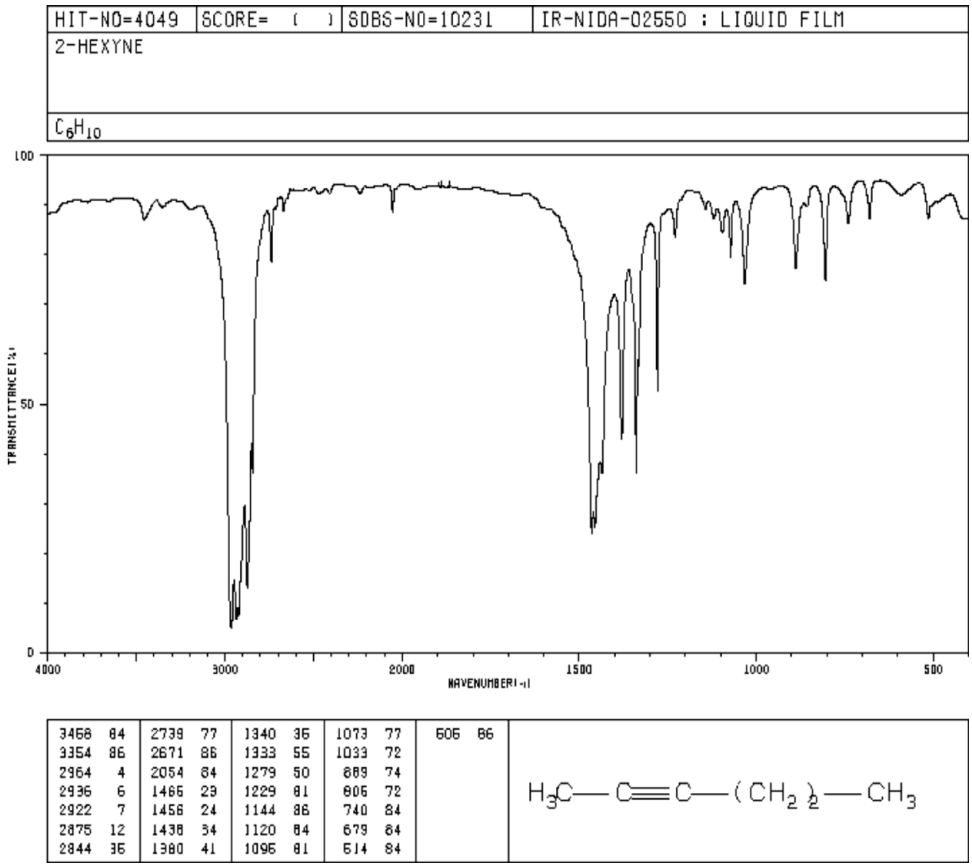
HIT-NO=1068	SCORE= ( )	SDBS-NO=568	IR-NIDA-05748 : LIQUID FILM
1-HEXYNE			
C_6H_{10}			



3926	77	2679	81	1432	39	1260	49	740	60
3455	72	2120	49	1380	46	1107	62	730	72
3311	7	2097	84	1366	68	1063	84	630	7
2962	4	1717	88	1344	64	983	81	666	64
2937	5	1690	81	1328	52	934	79	509	66
2876	11	1467	26	1320	58	895	81		
2738	79	1461	29	1300	68	793	84		



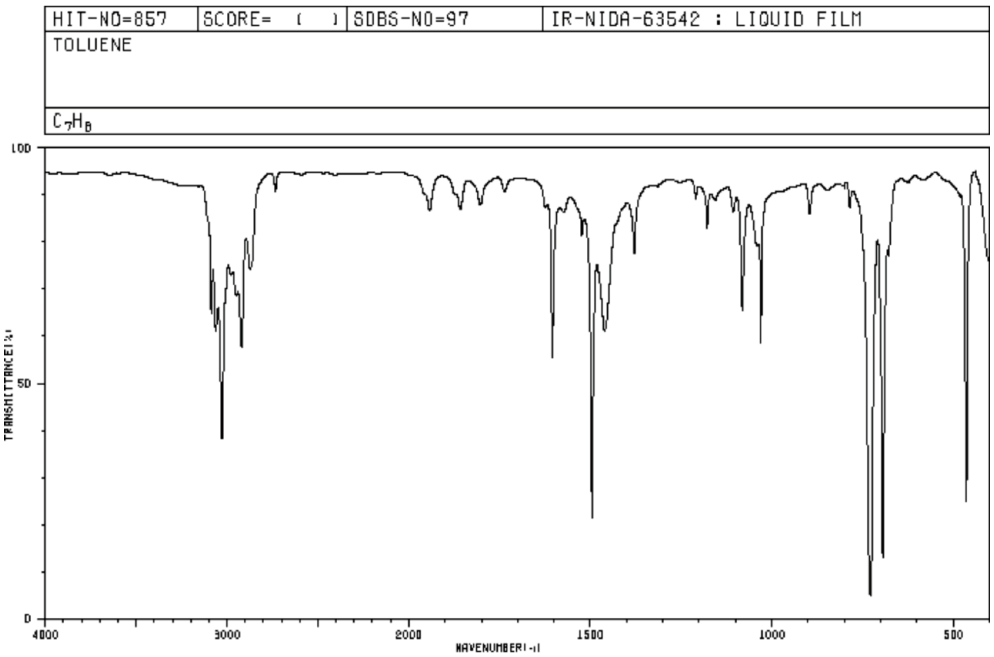
El espectro del 2-hexino muestra la desaparición de la banda C_{sp} -H.



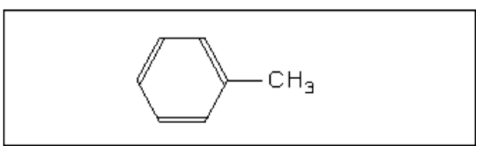
3468	84	2739	77	1340	36	1073	77	606	86		
3354	86	2671	86	1333	55	1033	72				
2964	4	2054	84	1279	50	889	74				
2936	6	1466	29	1229	81	806	72				
2922	7	1456	24	1144	86	740	84				
2875	12	1436	54	1120	84	679	84				
2844	36	1380	41	1096	81	614	84				

Aromáticos

Las vibraciones de estiramiento del enlace C_{sp}-H aromático aparecen entre los 3100 y los 3000 cm^{-1}.



3087	62	1868	84	1210	86	895	81
3062	58	1803	84	1179	79	786	84
3028	37	1605	55	1156	86	729	4
2948	66	1524	79	1107	84	696	12
2920	55	1496	20	1082	62	678	74
2873	70	1461	58	1042	77	455	29
1942	84	1379	74	1030	67		



Otra región importante está entre los 2000 y 1650 cm^{-1}, donde aparecen los sobretonos (peineta, por la forma).

Las vibraciones de estiramiento C-C del esqueleto anular aparecen entre 1600 y 1400 cm^{-1}.

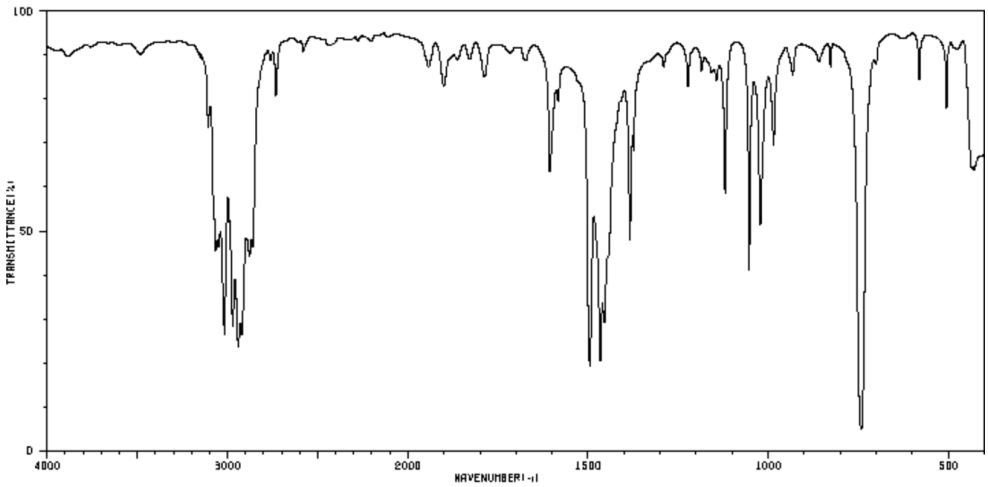
Las bandas más importantes e informativas de los compuestos aromáticos se encuentran entre los 900 y 675 cm^{-1}. Corresponden a vibraciones de deformación Csp2-H fuera del plano del anillo.

Se puede identificar el tipo de sustitución en los anillos aromáticos, observando la región de los 900 hasta 675 cm-1.Vea el recuadro que muestra las absorciones características del benceno mono y di-sustituido y los espectros del orto-xileno meta-xileno y para-xileno, como ejemplos de benceno disustituido. Es posible distinguir el tipo de sustitución, al analizar las diferencias que aparecen en la región entre los 830,0 cm^{-1} y los 690 cm^{-1} respectivamente.

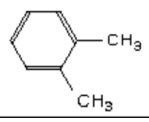
HIT-NO=1272	SCORE= ( )	SDBS-NO=1028	IR-NIDA-21942 : LIQUID FILM

O-XYLENE

C_8H_{10}



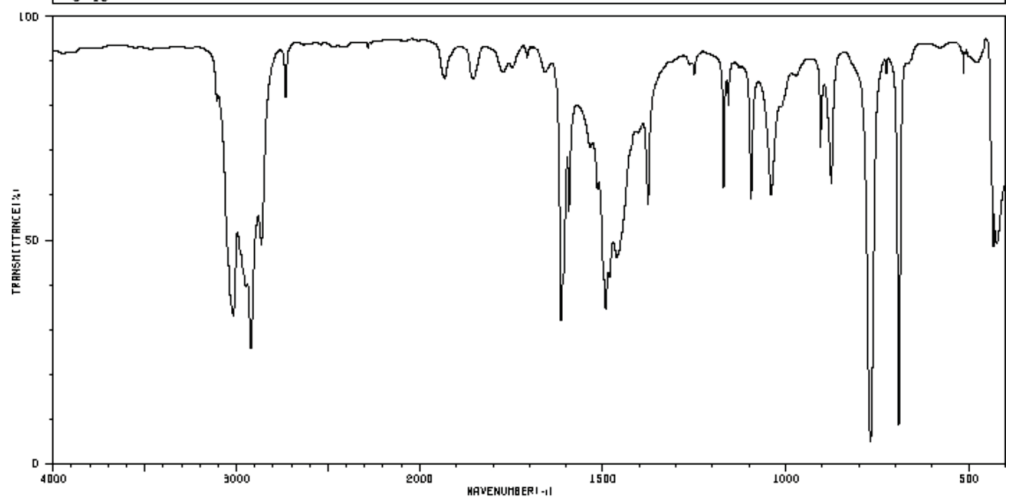
3108	70	2878	42	1683	77	1223	79	985	66
3066	43	2860	44	1495	18	1186	84	932	81
3050	44	2732	77	1467	20	1157	81	742	4
3018	25	1942	84	1456	27	1146	81	682	81
2971	26	1901	79	1384	46	1120	57	506	74
2940	22	1787	81	1374	86	1053	39	436	62
2921	25	1606	60	1291	84	1022	49	431	62



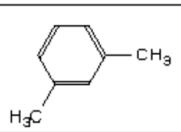
HIT-NO=1275	SCORE= ( )	SDBS-NO=1032	IR-NIDA-63601 : LIQUID FILM

M-XYLENE

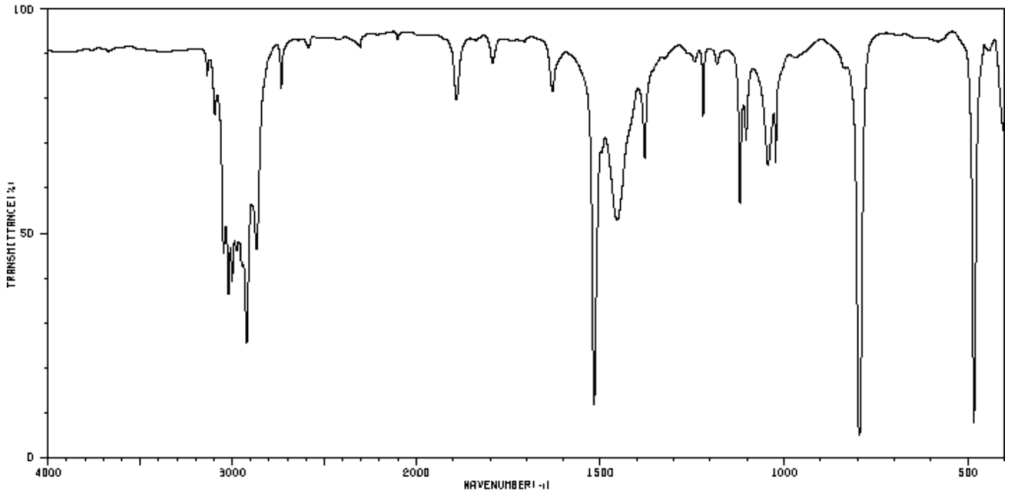
C_8H_{10}



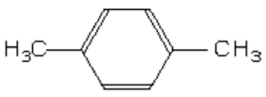
3106	79	1864	84	1492	33	1170	68	726	84
3016	32	1772	84	1482	39	1157	77	691	8
2948	37	1764	84	1462	44	1095	57	515	64
2921	24	1668	84	1376	55	1040	57	483	86
2864	47	1614	31	1263	86	905	68	478	86
2732	79	1592	59	1256	86	876	60	434	46
1932	84	1515	68	1250	84	769	4		



HIT-NO=1238	SCORE= ( )	SDBS-NO=899	IR-NIDA-63598 : LIQUID FILM
P-XYLENE			
C_8H_{10}			



3136	81	2923	24	1464	60	1043	62
3095	74	2868	44	1378	64	1023	64
3047	43	2733	78	1243	84	795	4
3020	35	1890	77	1220	72	484	7
3000	37	1793	84	1183	84		
2976	44	1630	78	1120	55		
2946	41	1616	11	1103	68		

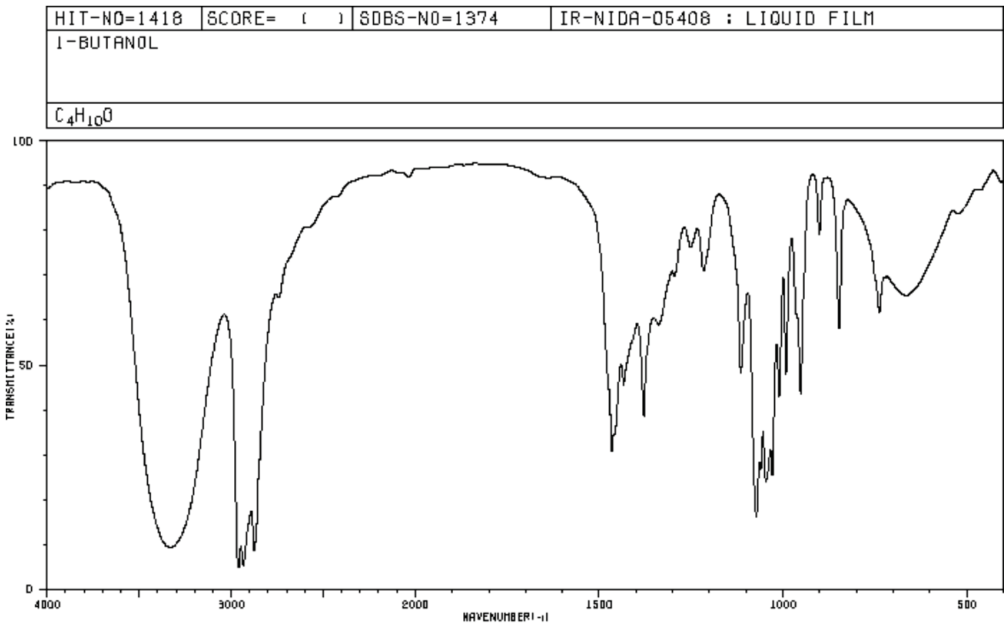


Alcoholes fenoles y éteres

La absorción común y característica de los alcoholes y fenoles está en la vibración de los enlaces O-H y C-O (ver el espectro del 1-butanol).

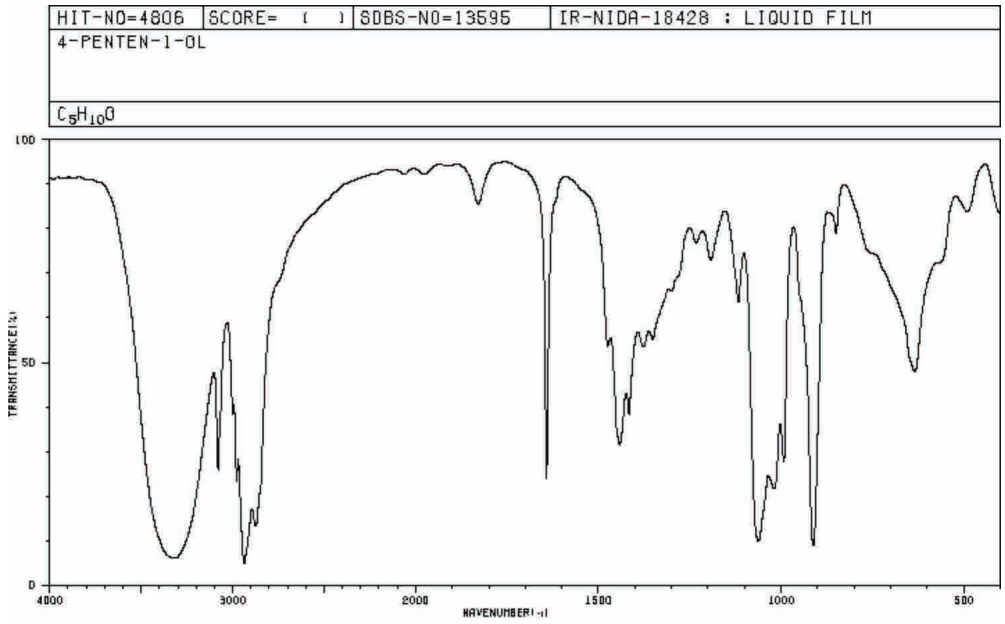
La vibración de estiramiento del enlace O-H aparece alrededor de los 3400 cm^{-1}; es una absorción intensa y amplia (desde 3600 hasta 3200 cm^{-1} aproximadamente).

Un alcohol en fase de vapor muestra una absorción fina no asociada (sin puente hidrógeno) cerca de los 3600 cm^{-1}. En fase líquida las asociaciones intermoleculares, debidas al enlace de hidrógeno, son importantes y se manifiestan con una banda roma, característica entre los 3500 y 3200 cm^{-1}.

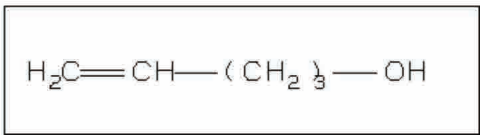


3333	9	1434	49	1079	15	901	77
3323	9	1379	37	1060	26	847	57
2960	4	1338	57	1047	23	738	58
2934	6	1296	68	1029	24	670	62
2875	8	1252	74	1011	42	665	62
1466	30	1217	68	992	46		
1461	33	1116	48	963	42		

En el espectro del 4-penten-1-ol, se observa las bandas típicas del –OH y del C=C.



3332	6	1828	81	1233	74	860	77
3322	6	1642	23	1193	70	634	46
3079	25	1475	52	1117	80	491	61
2998	36	1442	30	1062	9		
2978	22	1416	37	1019	20		
2937	4	1378	52	993	26		
2873	12	1362	69	912	8		

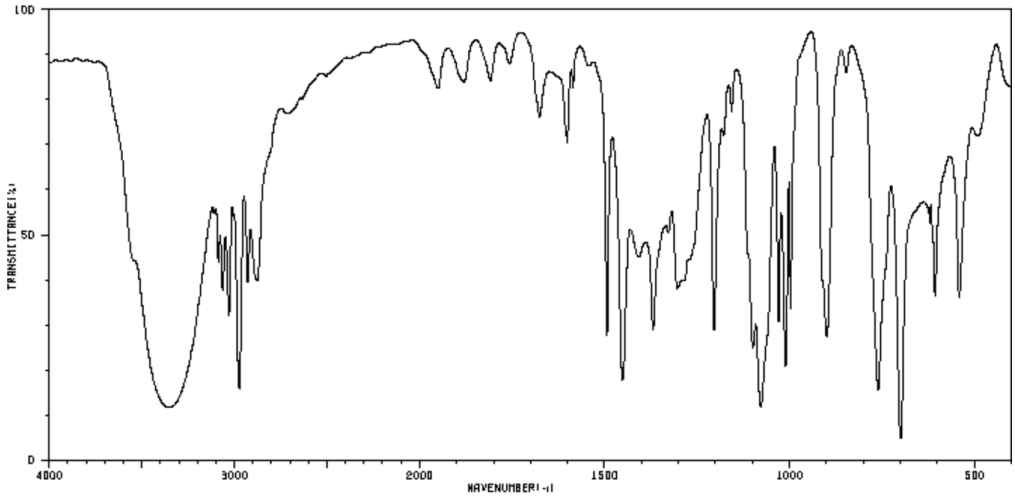


En el espectro del 1-feniletanol, se ve claramente la banda de estiramiento O-H, 3400 cm^{-1}, los sobretonos de las bandas de sustitución entre 2000 cm^{-1} y 1666,6 cm^{-1}; además las dos bandas de sustitución del anillo aromático a 760 cm^{-1} y 699 cm^{-1}, correspondientes a la monosustitución del benceno. Estas dos últimas bandas son las que generan los sobretonos a que se hace mención más arriba.

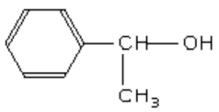
HIT-NO=1157	SCORE= ( )	SDBS-NO=732	IR-NIDA-56966 : LIQUID FILM

ALPHA-METHYLBENZYL ALCOHOL

$C_8H_{10}O$



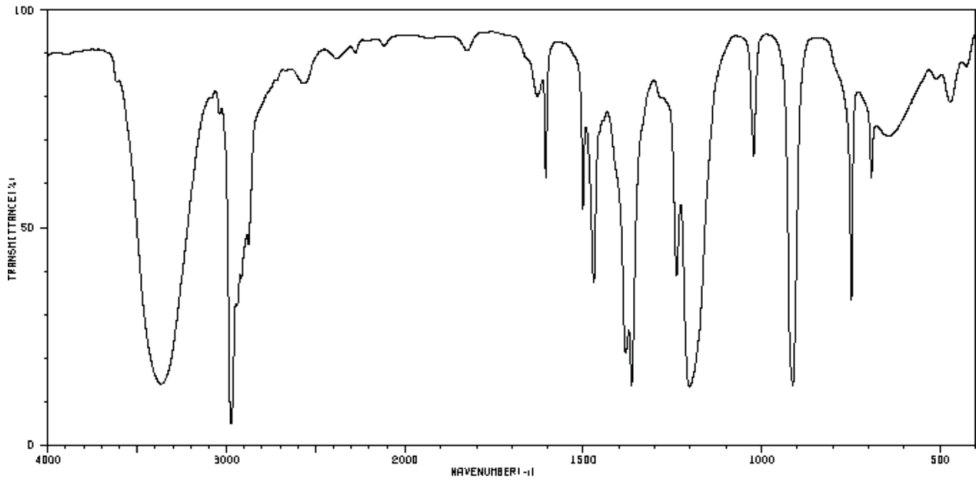
3364	11	2973	15	1369	27	1089	23	699	4
3353	11	2928	38	1327	49	1078	11	621	50
3343	11	2878	38	1304	37	1029	29	612	46
3107	62	1601	68	1290	38	1010	20	607	36
3086	42	1493	26	1285	38	997	32	541	35
3063	36	1451	17	1204	27	699	26	490	70
3030	31	1408	49	1178	70	761	16	486	70



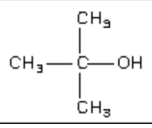
HIT-NO=1034	SCORE= ( )	SDBS-NO=506	IR-NIDA-05409 : LIQUID FILM

2-METHYL-2-PROPANOL

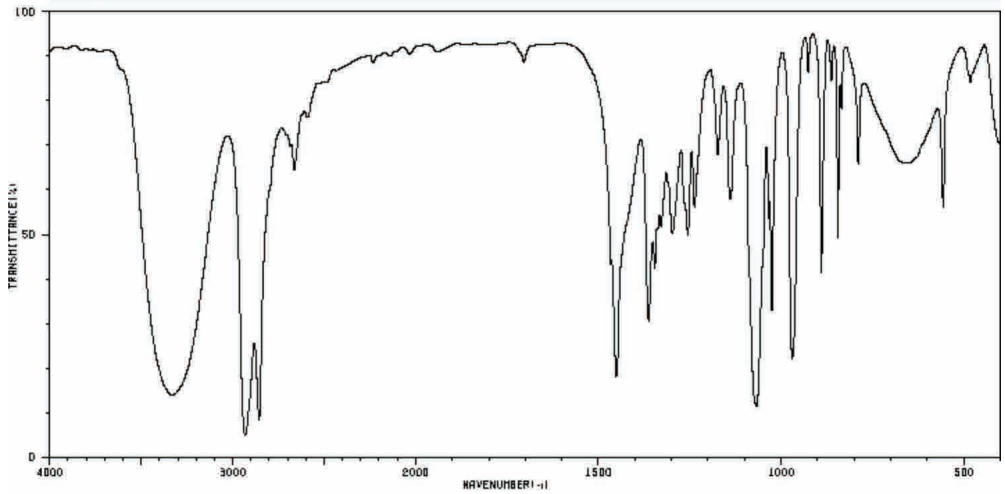
$C_4H_{10}O$



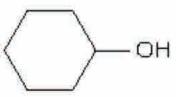
3366	13	1630	77	1202	12	611	81
3038	72	1606	58	1022	64	471	77
2974	4	1501	52	915	13		
2940	31	1471	36	749	32		
2875	44	1381	20	693	58		
2564	79	1365	13	646	66		
2386	86	1239	37	643	68		



HIT-NO=1077	SCORE= ( )	SDBS-NO=581	IR-NIDA-09018 : LIQUID FILM
CYCLOHEXANOL			
$C_6H_{12}O$			

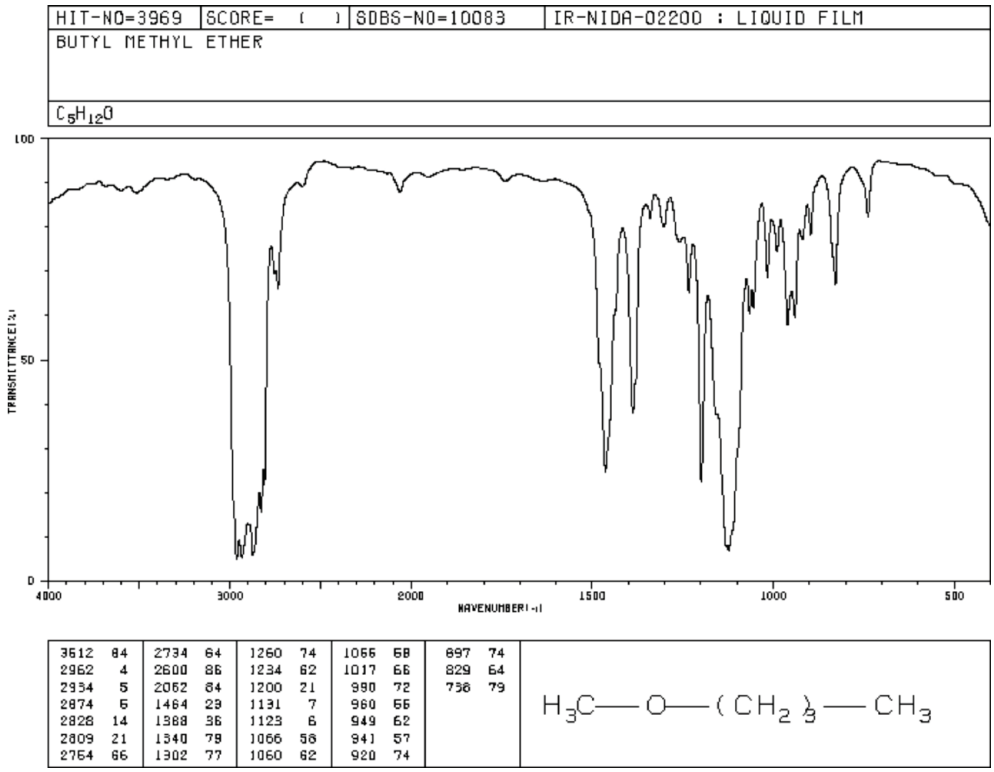


3331	13	1704	86	1266	47	970	21	667	64
2932	4	1467	42	1238	53	926	84	557	53
2855	8	1452	17	1174	66	890	39	482	61
2686	68	1363	29	1140	55	863	81		
2666	82	1346	41	1068	11	845	47		
2586	74	1329	50	1034	52	835	74		
2233	84	1298	49	1026	32	789	64		



Vibraciones del enlace C-O

En los alcoholes fenoles y éteres, estas absorciones son y corresponden al estiramiento entre los 1260 y 1000 cm^{-1}.



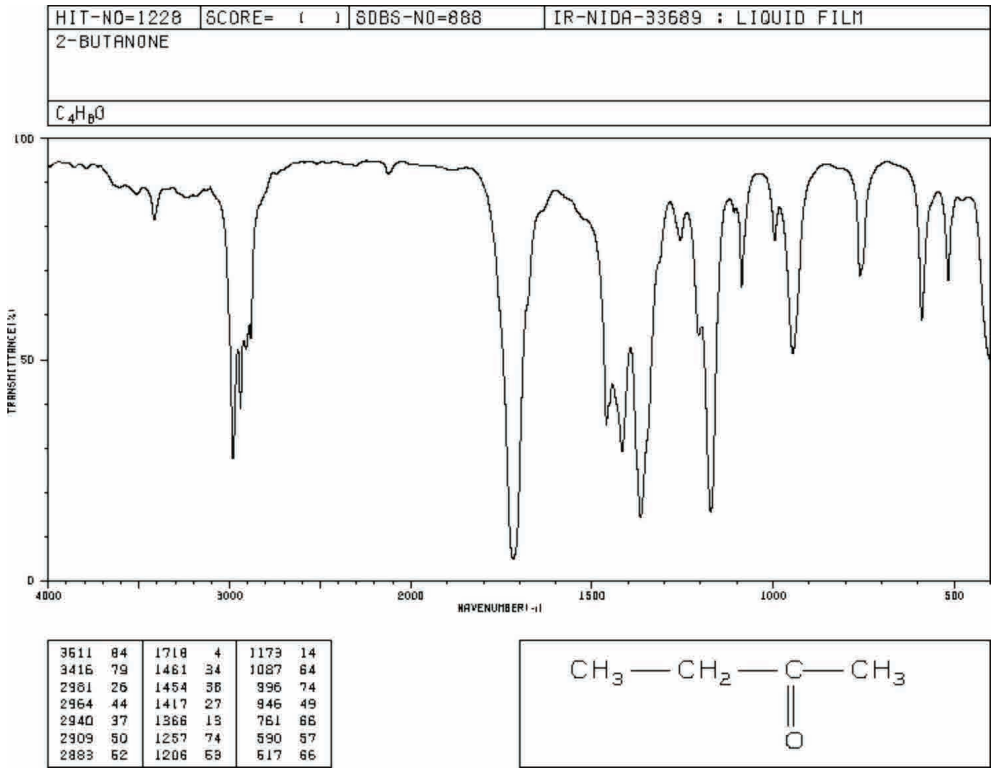
3612	84	2734	64	1260	74	1066	68	897	74
2962	4	2600	86	1234	62	1017	66	829	64
2934	5	2062	84	1200	21	980	72	736	79
2874	6	1464	29	1131	7	960	66		
2828	14	1388	36	1123	6	949	62		
2809	21	1340	79	1066	58	941	57		
2764	66	1302	77	1060	62	920	74		

El grupo carbonilo

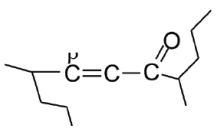
Las cetonas, aldehídos, ácidos carboxílicos, anhídridos y amidas, muestran una fuerte absorción del estiramiento del grupo carbonilo C=O entre 1870 y 1660 cm^{-1}. En este rango, las posiciones de las bandas de los grupos carbonilos están determinados, entre otros, por factores ambientales, tales como conjugación y entorno del carbonilo.

Cetonas

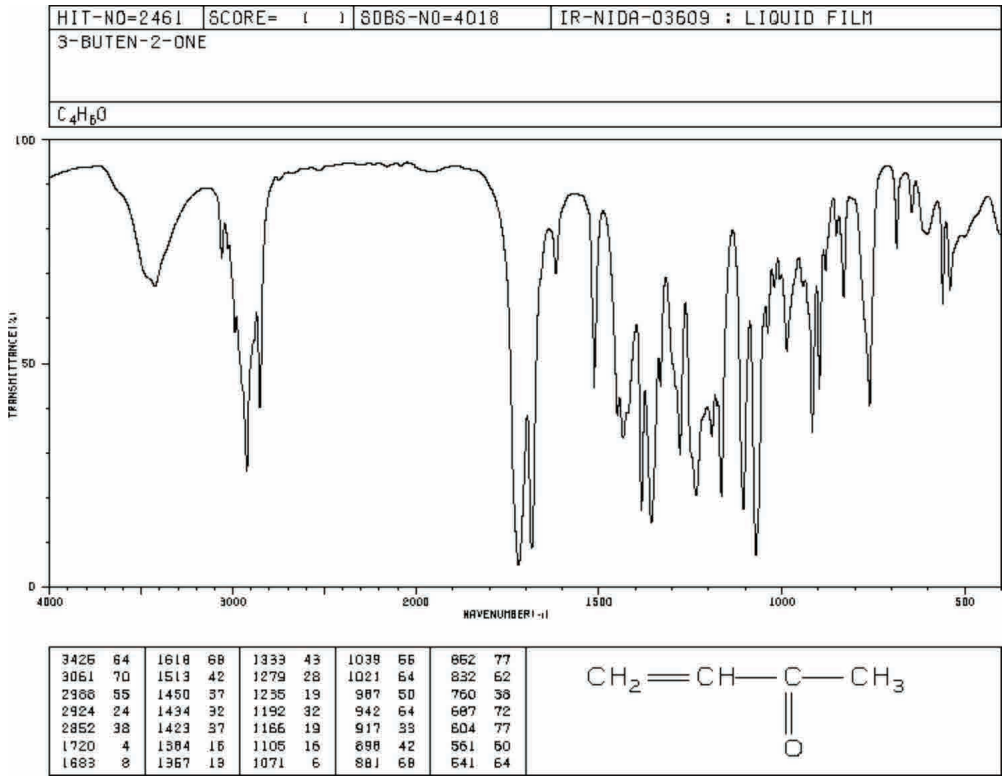
La vibración de estiramiento del grupo carbonilo aparece entre 1725 y 1705 cm^{-1}, para las cetonas saturadas.



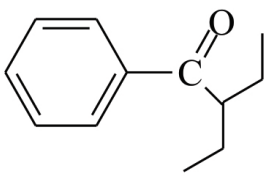
En las cetonas α,β no saturadas (Estructura 1a), baja hasta 1665 cm^{-1}. La conjugación estabiliza el enlace carbonilo, con lo que su energía desciende.



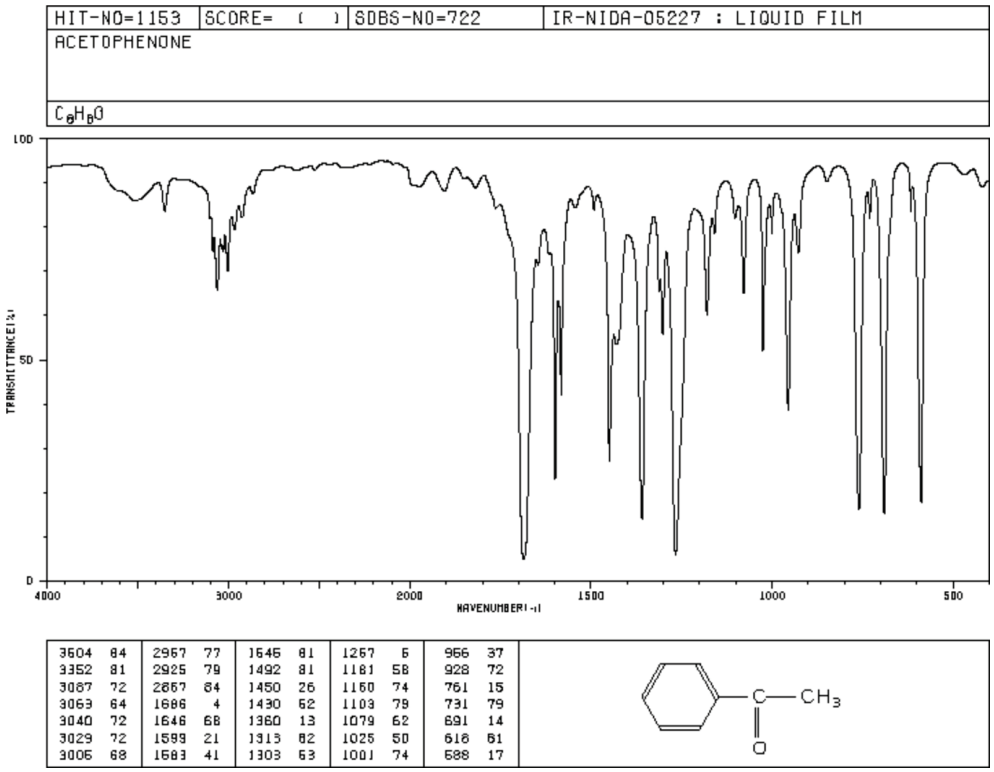
Estructura 1a



En los homólogos aromáticos (Estructura 1b), las absorciones descienden a 1700-1680 cm^{-1}.

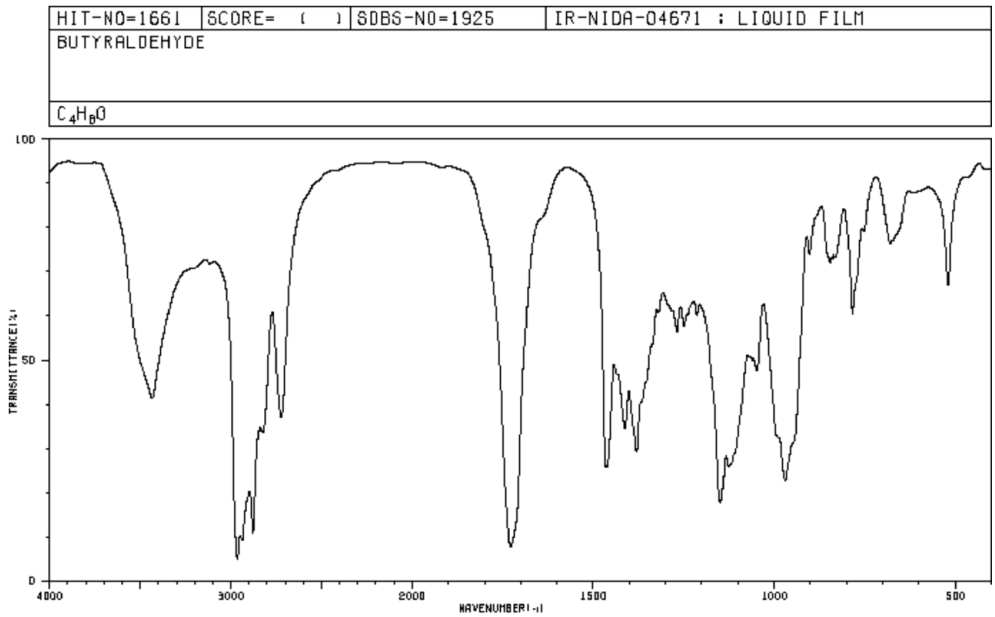


Estructura 1b

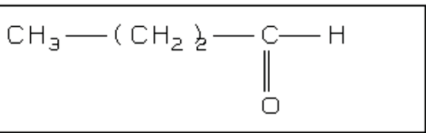


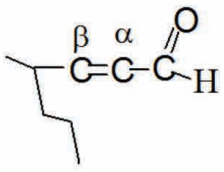
Aldehídos

Las vibraciones de estiramiento del grupo carbonilo en los aldehídos aparecen entre 1740 y 1680 cm^{-1}.



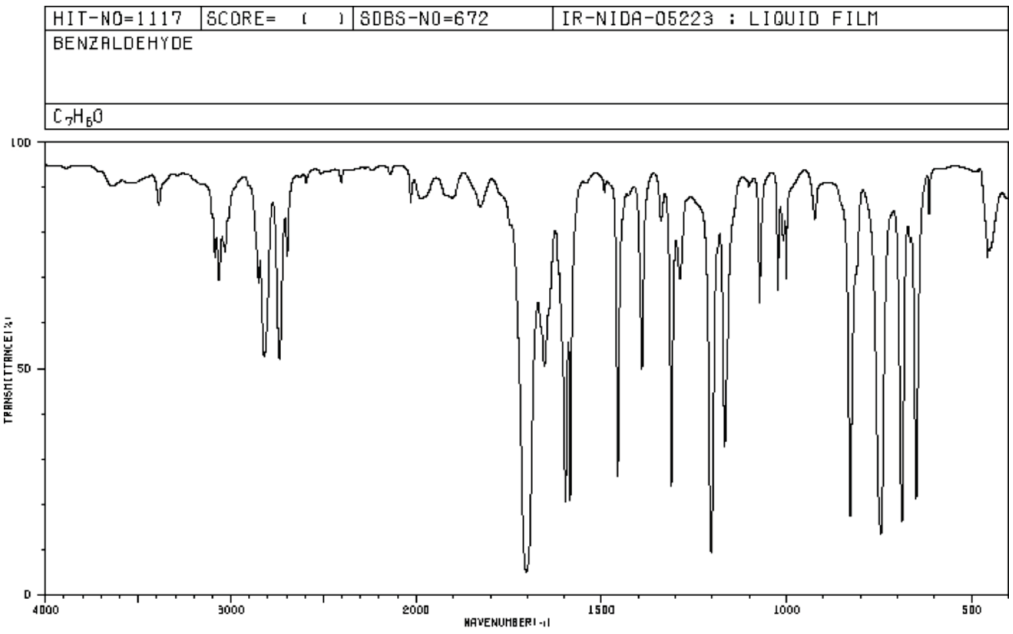
3436	39	1467	24	1160	17	839	70
2963	4	1462	25	1126	25	832	70
2938	8	1413	35	1060	47	785	58
2877	10	1381	27	1048	46	681	74
2824	32	1269	53	970	21	669	74
2722	35	1249	55	902	70	520	64
1728	7	1214	58	845	70		



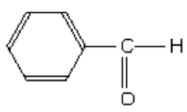


Estructura 2

Las vibraciones de estiramiento del grupo C_{sp2}-H, de los aldehídos aparecen en forma de dos bandas: Una de ellas entre 2900-2820 cm^{-1} y la otra entre 2775-2700 cm^{-1}. Estas bandas, generalmente, están escondidas por las bandas de vibración del estiramiento C_{sp3}-H de los alcanos.

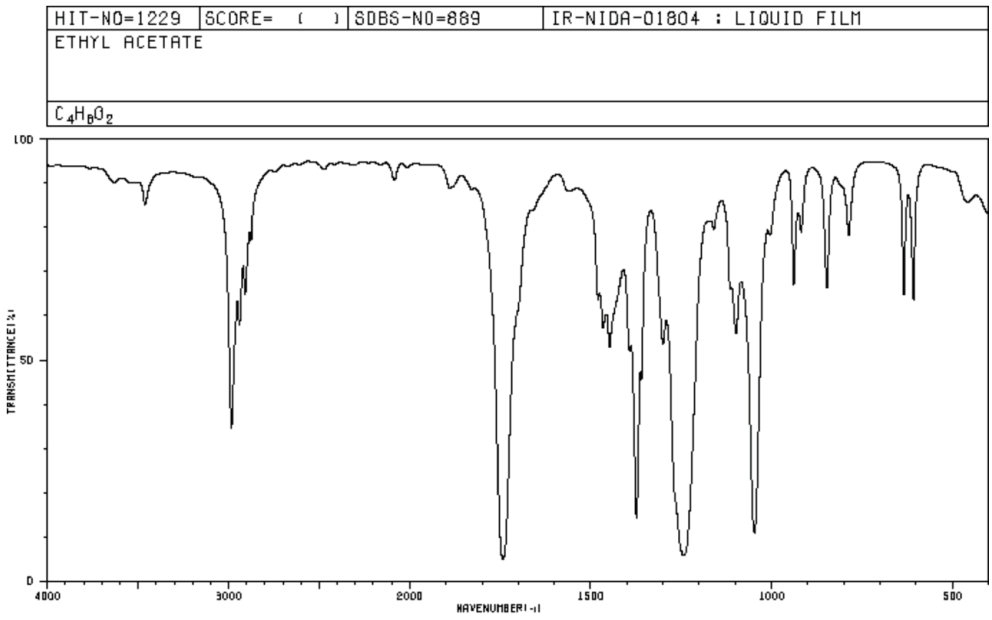


3086	72	1981	84	1697	20	1204	8	828	16
3065	66	1916	84	1584	20	1168	31	746	13
3031	72	1909	84	1456	25	1073	62	686	15
2850	66	1901	84	1391	47	1023	64	667	74
2820	50	1828	81	1339	79	1008	74	650	20
2736	50	1703	4	1311	23	1001	66	615	61
2696	72	1664	40	1288	68	924	79	457	72

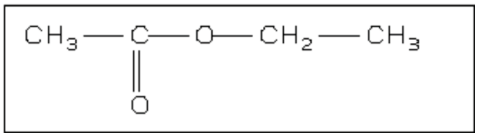


Ésteres

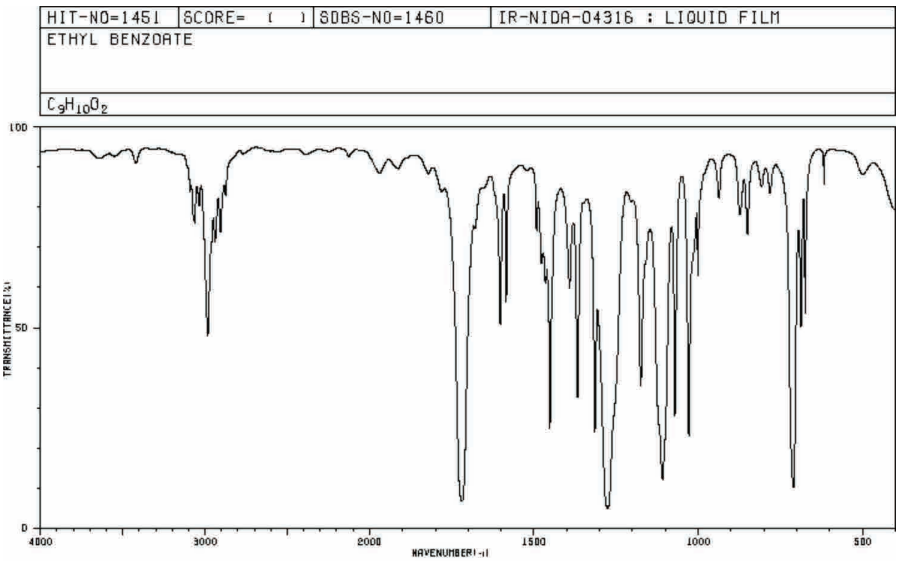
Estos compuestos, el estiramiento del grupo carbonilo aparece según sea saturado entre 1750 y 1735 cm^{-1}; o α,β no saturados y arílicos (Estructura 3), entre 1730 y 1717 cm^{-1}.



3462	81	1480	60	1243	5	847	64
2983	33	1466	55	1160	77	786	74
2940	55	1448	50	1111	64	634	62
2908	62	1393	60	1098	53	608	60
2877	74	1374	13	1048	10	457	81
1869	86	1360	45	939	84		
1743	4	1301	62	917	77		

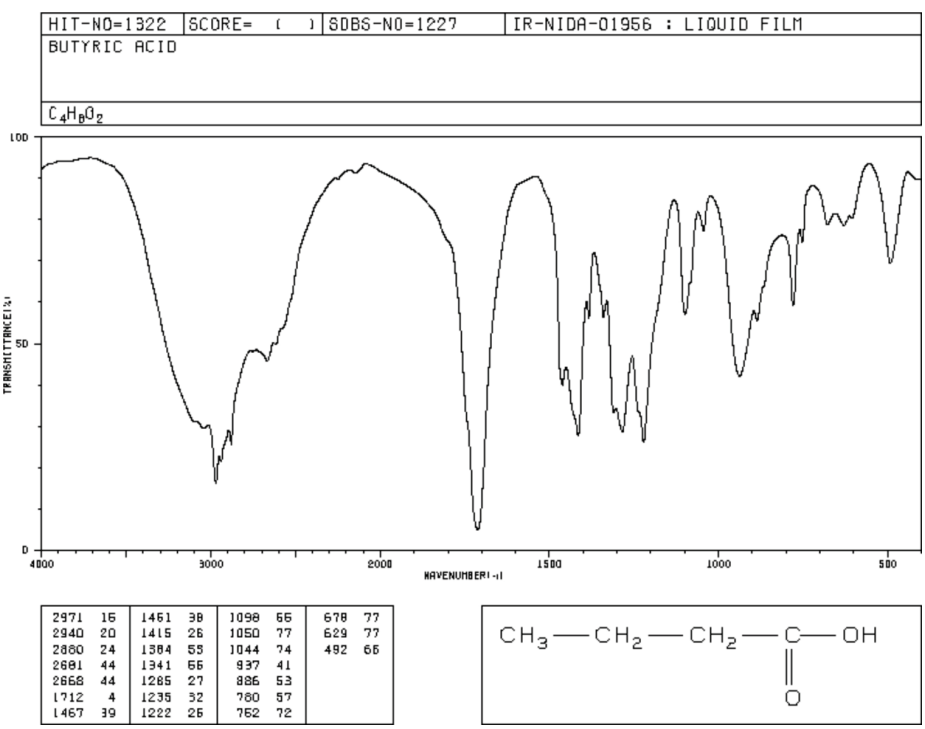


Estructura 3

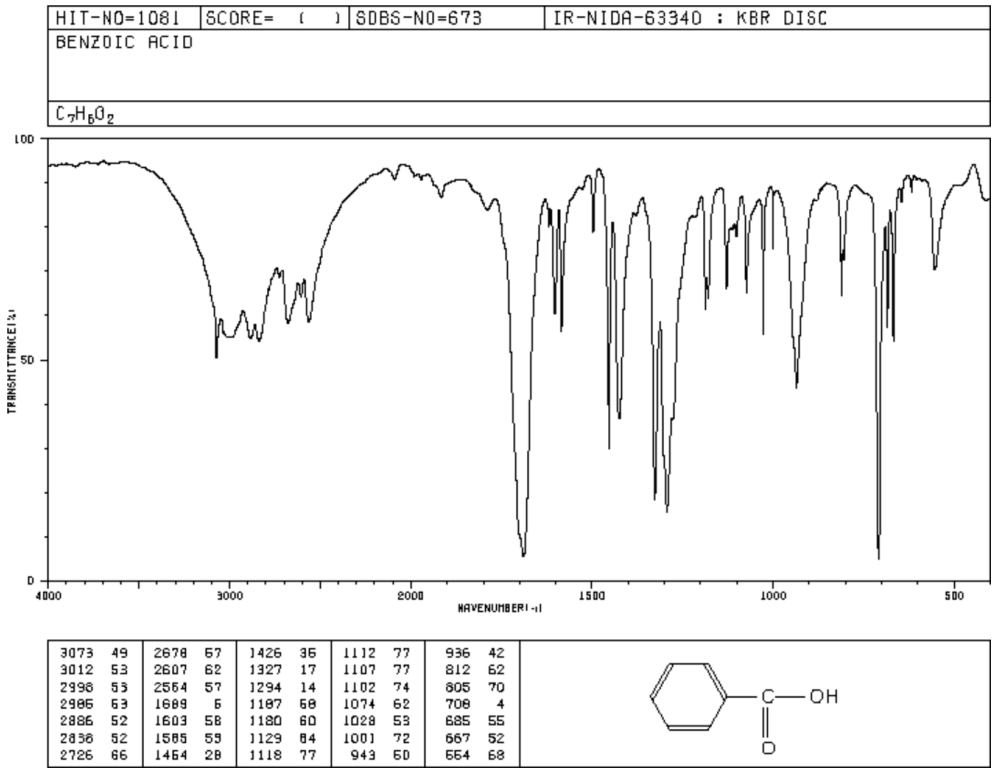


Ácidos carboxílicos

El estiramiento del enlace C=O en ácidos orgánicos saturados aparece entre los 1725 y 1700 cm^{-1}. Es una banda ancha y característica.



En los ácido α,β no saturados, la banda aparece entre 1715 y 1690 cm^{-1}; y la conjugación con arílicos, entre 1700 y 1660 cm^{-1}.



Las vibraciones de estiramiento del grupo hidroxilo (O-H) aparece entre los 2700 y 3500 cm^{-1}, como banda muy ancha.

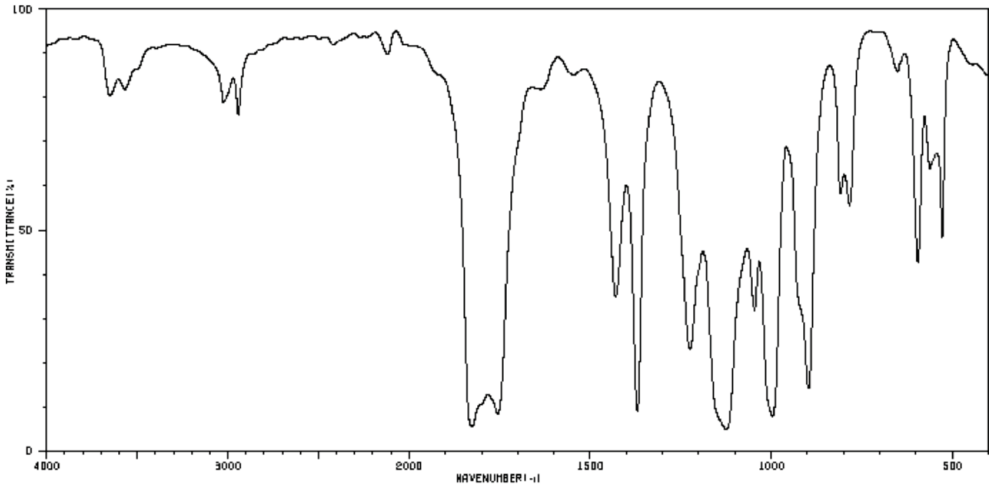
Anhídridos de ácidos carboxílicos

Los anhídridos de ácido saturados y aromáticos muestran una vibración de estiramiento doble C=O. Una entre 1850 y 1800 cm^{-1} y la otra entre 1790–1740 cm^{-1}, respectivamente

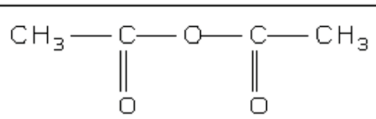
HIT-NO=1277	SCORE= ( )	SDBS-NO=1034	IR-NIDA-05414 : LIQUID FILM

ACETIC ANHYDRIDE

$C_4H_6O_3$



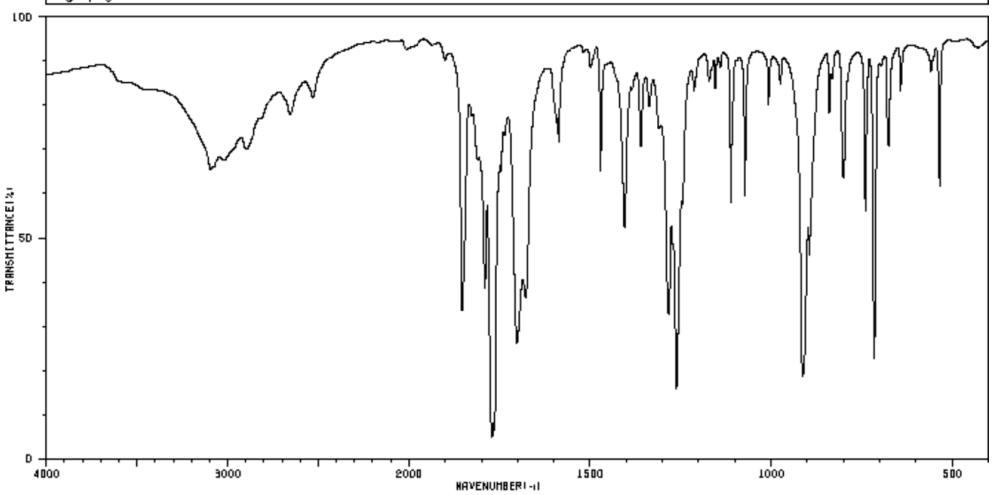
3650	77	1647	81	997	7	663	62
3567	79	1542	81	897	13	543	64
3025	77	1430	35	809	55	529	46
2942	72	1370	8	799	60		
2119	86	1226	22	784	53		
1827	5	1124	4	651	61		
1756	8	1046	30	596	41		



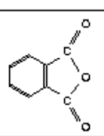
HIT-NO=1089	SCORE= ( )	SDBS-NO=715	IR-NIDA-04980 : KBR DISC

PHTHALIC ANHYDRIDE

$C_8H_4O_3$



3096	62	1790	37	1587	68	1262	15	840	74
3084	64	1771	4	1471	62	1214	79	801	60
3073	64	1764	6	1405	50	1111	55	740	53
2896	68	1746	62	1360	68	1072	67	716	21
2855	74	1702	25	1337	77	1008	77	675	68
2529	79	1677	35	1283	31	913	18	643	79
1854	32	1593	72	1272	46	895	44	536	68

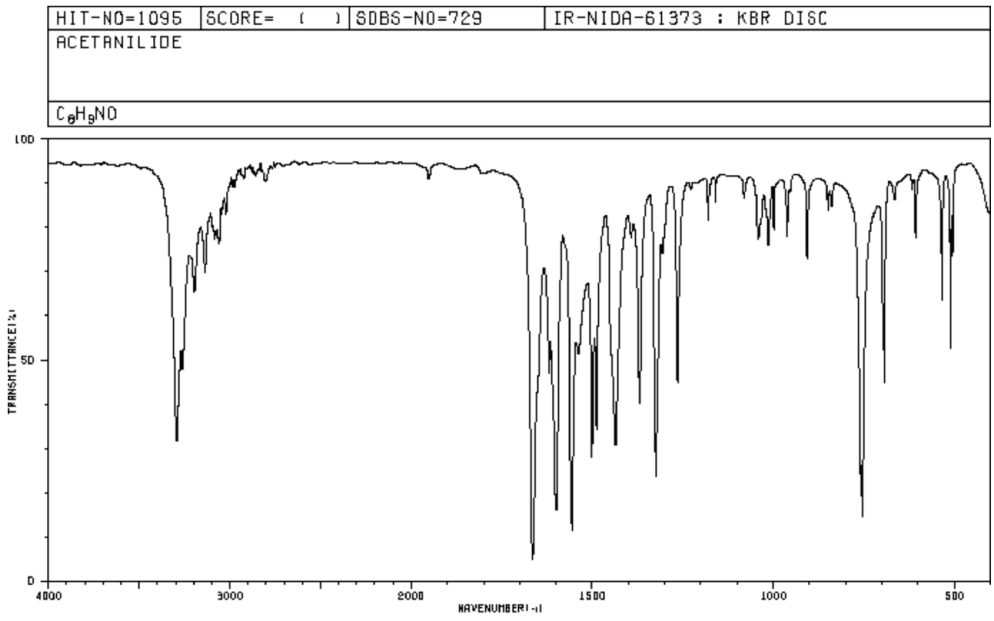


Amidas

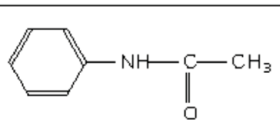
Las vibraciones de estiramiento del carbonilo C=O en amidas primarias, secundarias se manifiestan entre los 1700 y los 1630 cm^{-1}.

El estiramiento N-H en las amidas primarias aparece en dos bandas. Una en3500 cm^{-1} y la otra en 3400 cm^{-1}. En las secundarias, aparece solo una banda en 3320-3140 cm^{-1}.

Las vibraciones de deformación N-H primarias están entre 1620 y 1590 cm^{-1} y las secundarias entre 1550 y 1510 cm^{-1}.

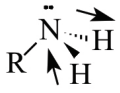


3294	30	3022	79	1489	33	1180	78	761	23
3261	46	1665	4	1436	29	1042	74	754	13
3196	62	1620	44	1393	74	1014	72	694	43
3137	66	1598	16	1369	38	999	77	607	74
3083	74	1557	10	1324	22	962	74	534	60
3059	74	1538	49	1307	72	908	70	511	50
3045	79	1501	26	1265	43	768	62	506	70

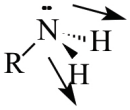


Aminas alifáticas

El estiramiento del enlace N_{sp3}-H de las aminas primarias se manifiesta con dos bandas, una vibración asimétrica de mayor energía en 3500 cm^{-1} y la simétrica en 3400 cm^{-1}.

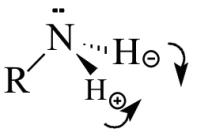


asimétrica
3500 cm^{-1}

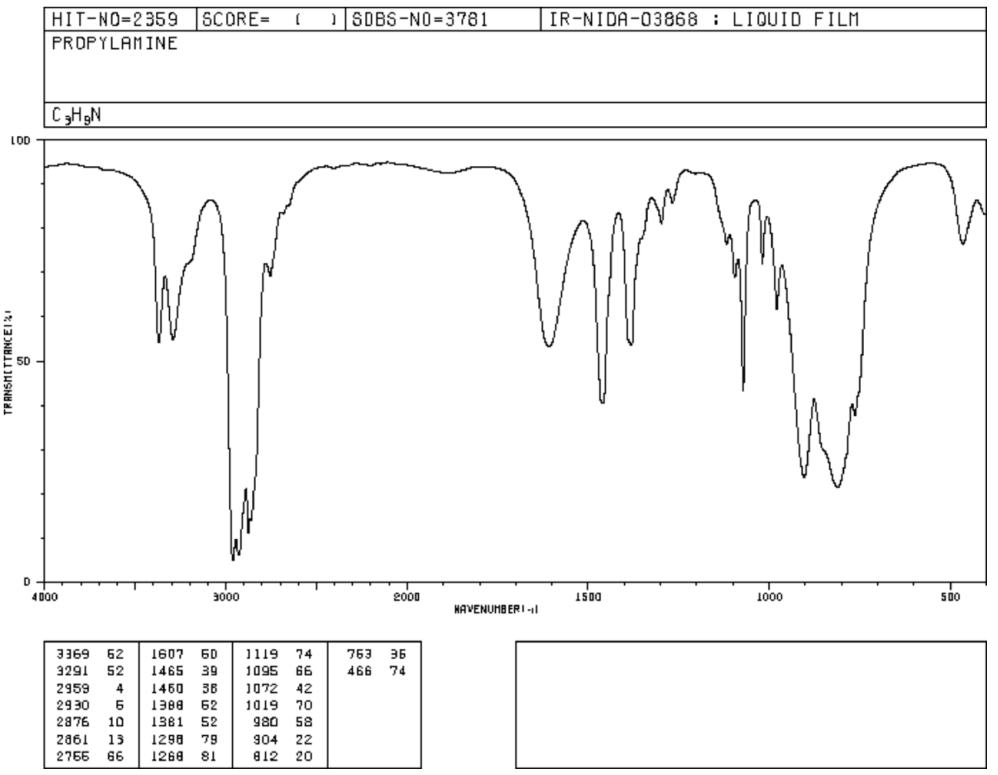


simétrica
3400 cm^{-1}

La vibración de deformación del enlace N_{sp3}-H aparece en las aminas primarias entre 1650 y 1590 cm^{-1}.

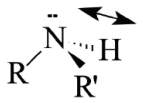


Deformación
1650-1590 cm^{-1}

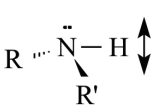


3369	62	1607	60	1119	74	763	36
3291	52	1465	39	1095	66	466	74
2959	4	1460	36	1072	42		
2930	6	1388	62	1019	70		
2876	10	1381	52	980	58		
2861	13	1298	79	904	22		
2755	66	1268	81	812	20		

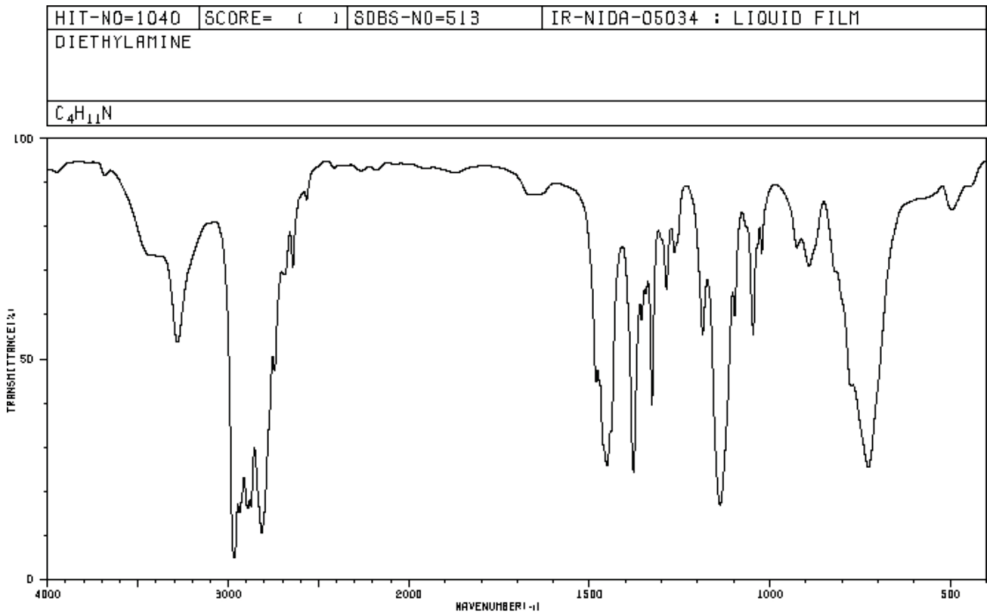
En las aminas secundarias, solo aparece como es de esperar, una sola banda de estiramiento N-H entre 3500 y 3310 cm^{-1}. La deformación N_{sp3}-H está entre 1650 cm^{-1} y 1550 cm^{-1}.



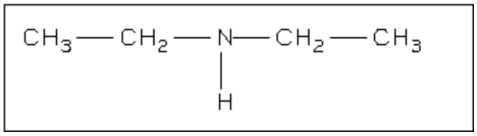
estiramiento
3500-3310 cm^{-1}



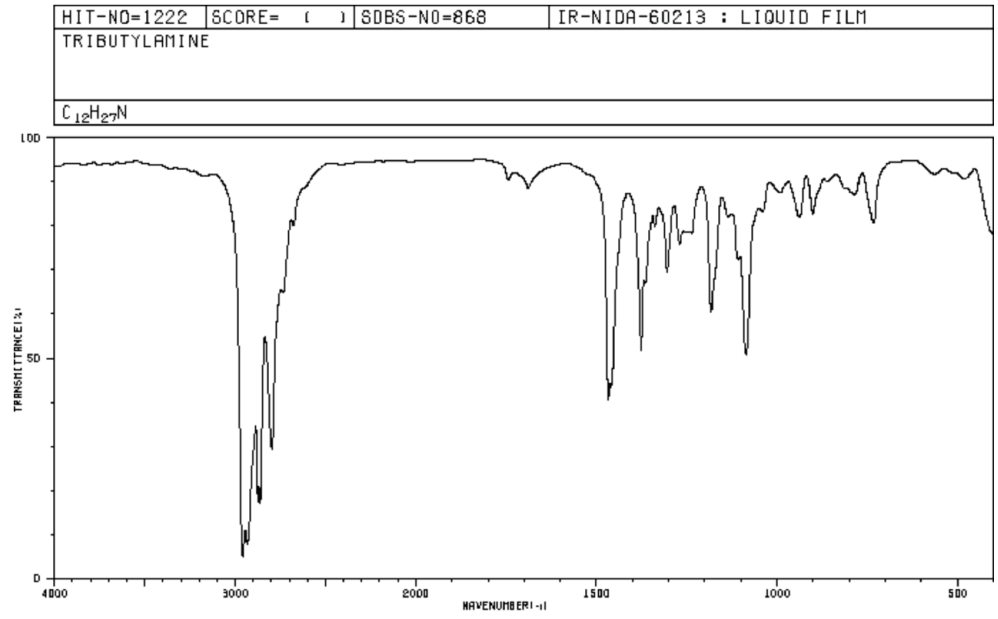
deformación
1650-1550 cm^{-1}



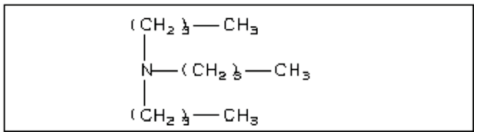
3281	62	2643	68	1287	62	926	72
2968	4	2568	84	1265	72	891	68
2936	14	1462	45	1187	53	727	24
2892	15	1452	24	1138	16	496	81
2873	15	1378	23	1097	57		
2814	10	1358	57	1046	53		
2744	44	1327	38	1023	70		



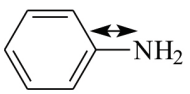
En las aminas terciarias desaparece la vibración N-H. Vea el siguiente espectro:



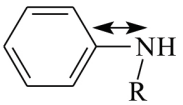
2957	4	1468	38	1253	74	794	84
2933	7	1460	42	1183	58	765	84
2873	16	1377	49	1065	49	733	77
2863	16	1365	64	996	84		
2798	28	1339	77	991	84		
2677	77	1305	65	936	79		
1689	84	1270	72	901	79		



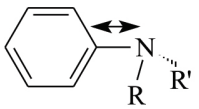
El estiramiento del enlace C-N, aparece para los aromáticos primarios entre 1340 y 1250 cm^{-1}. En los aromáticos secundarios entre 1350 y 1280 cm^{-1}. Los aromáticos terciarios muestran una absorción entre 1360 y 1310 cm^{-1}.



1340-1250 cm^{-1}

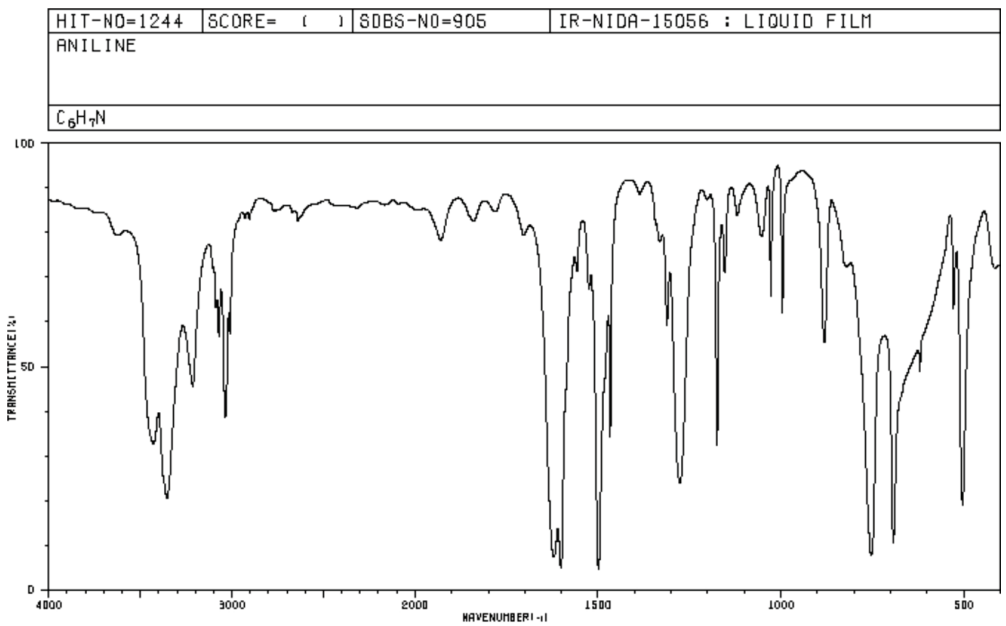


1350-1280 cm^{-1}



1360-1310 cm^{-1}

Y en las alifáticas, el estiramiento C-N entre 1220 y 1020 cm^{-1}.



Compuestos halogenados

El estiramiento de los enlaces C-X de los compuestos halogenados aparece en las siguientes frecuencias:

C-F entre 1400-1000 cm^{-1} C-Cl entre 800 y 600 cm^{-1}

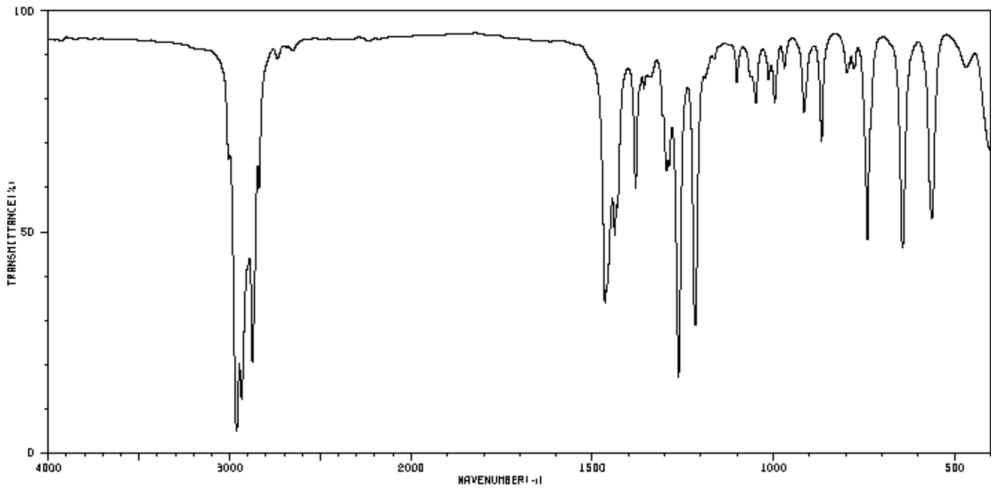
C-Br entre 600 y 500 cm^{-1} C-I aproximadamente en los 500 cm^{-1}

El efecto de la electronegatividad del halógeno es muy marcada en la energía del enlace.

HIT-NO=1320	SCORE= ( )	SDBS-NO=1225	IR-NIDA-63044 : LIQUID FILM

1-BROMOBUTANE

C_4H_9BR

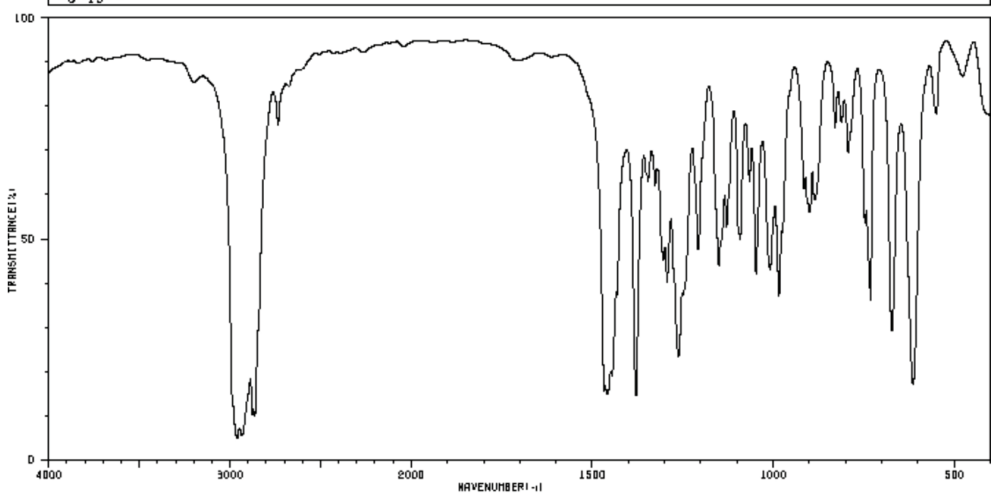


2962	4	1438	47	1216	27	916	74	644	44
2935	11	1431	53	1101	81	867	68	563	50
2875	20	1381	57	1060	81	797	64	469	64
2838	67	1368	79	1049	77	790	64		
2737	86	1295	62	1014	81	783	84		
1466	32	1289	62	997	77	777	64		
1460	36	1262	16	970	84	741	46		

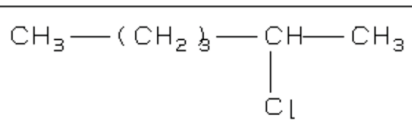
HIT-NO=3018	SCORE= ( )	SDBS-NO=5546	IR-NIDA-09748 : LIQUID FILM

2-CHLOROHEXANE

$C_6H_{13}CL$



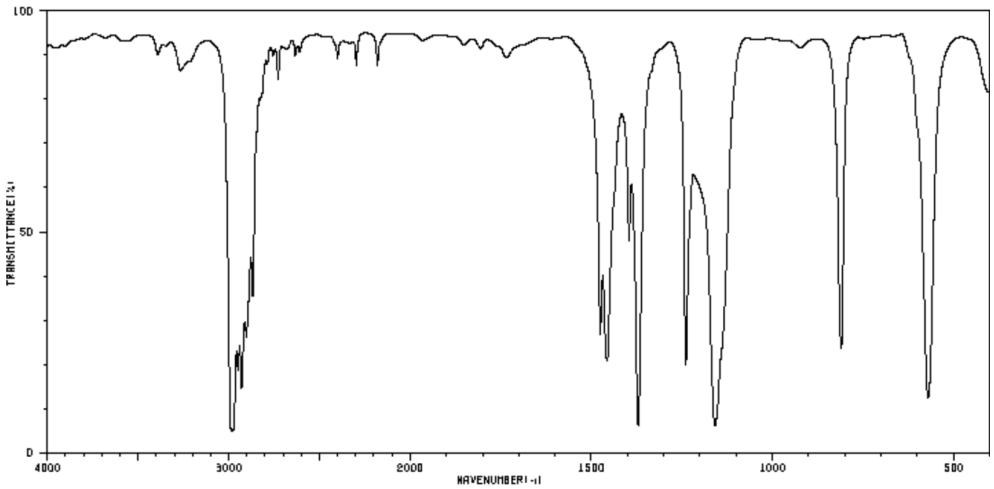
2961	4	1379	19	1260	35	1048	41	885	57
2933	5	1352	62	1208	46	1008	41	829	72
2875	9	1347	60	1160	55	985	35	794	66
2864	9	1327	60	1151	42	974	49	747	62
1468	14	1304	43	1128	50	915	58	732	35
1460	14	1294	38	1091	47	906	55	672	27
1446	18	1262	22	1066	60	899	69	614	16



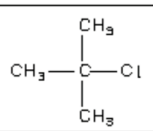
HIT-NO=1327	SCORE= ( )	SDBS-NO=1233	IR-NIDA-03720 : LIQUID FILM

2-CHLORO-2-METHYLPROPANE

C_4H_9CL



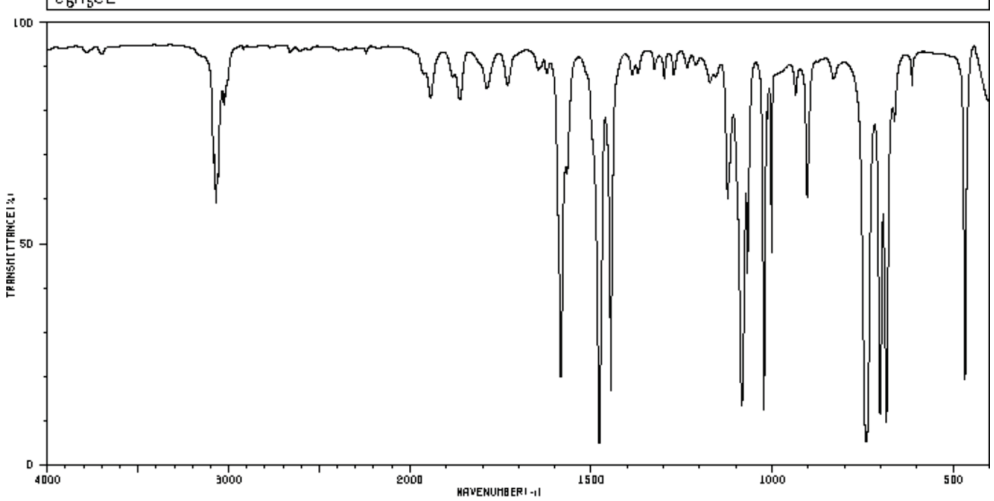
3267	84	2767	86	1475	26	671	12				
2986	4	2727	81	1456	20						
2976	4	2634	86	1396	46						
2949	17	2401	86	1371	6						
2929	13	2296	84	1240	18						
2902	25	2180	84	1159	5						
2868	34	1734	86	810	22						



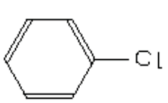
HIT-NO=1734	SCORE= ( )	SDBS-NO=2109	IR-NIDA-05126 : LIQUID FILM

CHLOROBENZENE

C_6H_5CL



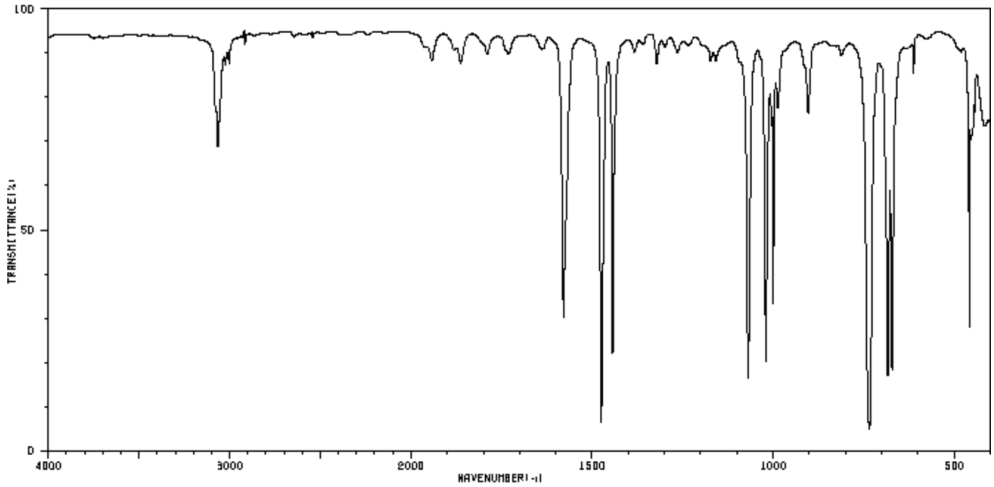
3084	66	1876	84	1478	4	1083	13	831	84		
3070	57	1862	79	1446	16	1068	42	740	5		
3059	62	1788	81	1298	84	1023	12	702	10		
3026	79	1730	81	1273	84	1013	74	686	9		
3016	79	1622	84	1172	84	1002	46	662	74		
1956	84	1584	18	1163	84	935	81	614	81		
1943	79	1586	62	1123	58	903	58	468	18		



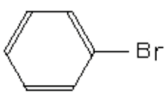
HIT-NO=1058	SCORE= ( )	SDBS-NO=550	IR-NIDA-63553 : LIQUID FILM

BROMOBENZENE

C_6H_5BR



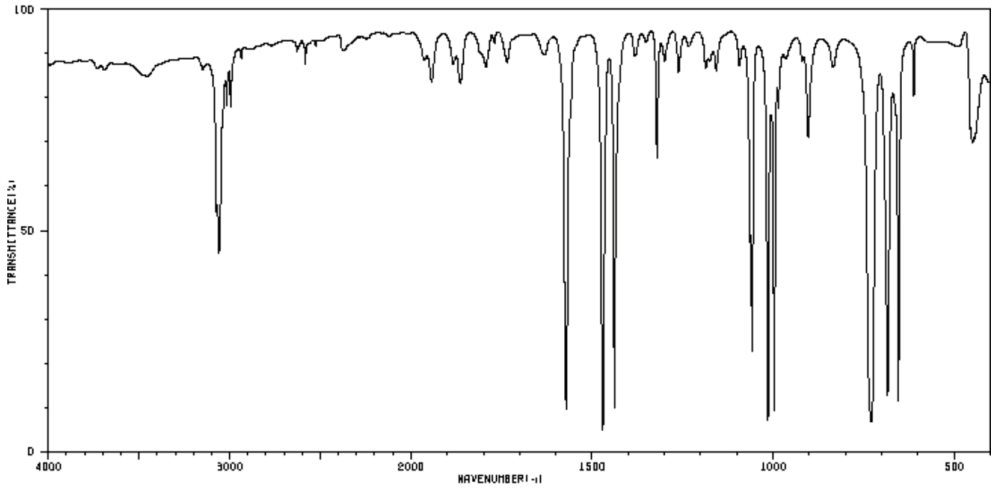
3077	74	1780	86	1158	84	812	86
3066	86	1730	86	1069	15	735	4
3055	72	1579	29	1020	19	684	15
3024	84	1476	6	1006	70	672	17
3003	84	1443	21	1000	32	613	81
1942	84	1322	64	966	74	457	26
1862	84	1174	84	903	72	447	72



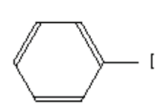
HIT-NO=1470	SCORE= ( )	SDBS-NO=1555	IR-NIDA-01889 : LIQUID FILM

IODOBENZENE

C_6H_5I



3476	81	2985	74	1439	9	1093	84	835	84
3465	81	1943	81	1321	64	1064	44	729	6
3455	81	1883	84	1300	84	1058	21	685	12
3148	84	1863	79	1262	81	1016	6	655	10
3072	52	1735	84	1186	84	997	8	612	77
3059	43	1572	9	1175	84	986	74	457	70
3017	74	1471	4	1157	81	903	68	450	66



BANDAS DE ABSORCION IR MAS COMUNES

Función	Banda[a]	(cm^{-1})
Alcanos	C-H t	2950-2800
	CH_2 d	~1465
	CH_3 d	~1375
	CH_2 d (4 ó más)	~720
Alquenos	=CH t	3100-3010
	C=C t (aislado)	1690-1630
	C=C t (conjugado)	1640-1610
	C-H d (en el plano)	1430-1290
	C-H d (monosustituído)	~990 y ~910
	C-H d (disustituído - E)	~970
	C-H d (disustituído - 1,1)	~890
	C-H d (disustituído - Z)	~700
	C-H d (trisustituído)	~815
Alquinos	C-H t (acetilénico)	~3300
	CC t (triple enlace)	~2150
	C-H d (acetilénico)	650-600
Aromáticos	C-H t	3020-3000
	C=C t	~1600 y ~1475
	C-H d (mono)	770-730 y 715-685
	C-H d (orto)	770-735
	C-H d (meta)	~880 y ~780 y ~690
	C-H d (para)	850-800
Alcoholes	O-H t	~3650 o 3400-3300
	C-O t	1260-1000
Éteres	C-O-C t (dialquil)	1300-1000
	C-O-C t (diaril)	~1250 y ~1120
Aldehídos	C-H t (aldehído)	~2850 y ~2750
	C=O t	~1725
Cetonas	C=O t	~1715
	C-C t	1300-1100
Ácidos carboxílicos	O-H t	3400-2400
	C=O t	1730-1700
	C-O t	1320-1210
	O-H d	1440-1400
Ésteres	C=O t	1750-1735
	C-C(O)-C t (acetatos)	1260-1230
	C-C(O)-C st (el resto)	1210-1160

Cloruros de ácidos	C=O t	1810-1775
	C-Cl st	730-550
Anhídridos	C=O t	1830-1800 y 1775-1740
	C-O t	1300-900
Aminas	N-H t	3500-3300
	N-H d	1640-1500
	C-N t (alquil)	1200-1025
	C-N t (aril)	1360-1250
	N-H d	~800
Amidas	N-H t	3500-3180
	C=O t	1680-1630
	N-H d	1640-1550
	N-H d (1°)	1570-1515
Haluros de alquilo	C-F t	1400-1000
	C-Cl t	785-540
	C-Br t	650-510
	C-I t	600-485
Nitrilos	C,N t (triple enlace)	~2250
Isocianatos	-N=C=O t	~2270
Isotiocianatos	-N=C=S t	~2125
Iminas	R_2C=N-R t	1690-1640
Grupos nitro	-NO_2 (alifáico)	1600-1530 1390-1300
	-NO_2 (aromático)	1550-1490 1355-1315
Mercaptanos	S-H t	~2550
Sulfóxidos	S=O t	~1050
Sulfonas	S=O t	~1300 y ~1150
Sulfonatos	S=O t	~1350 y ~11750
	S-O t	1000-750
Fosfinas	P-H t	2320-2270
	PH d	1090-810
Óxidos de fosfina	P=O t	1210-1140

[a] t = vibración de tensión; d = vibración de deformación

BIBLIOGRAFÍA GENERAL

- Carey, F.A.. 2006. Química Orgánica. Sexta edición, Mc Graw Hill. México.
- Wade, L.G. Jr. 2012. Química Orgánica. Volumen 1 y 2. Séptima edición. Pearson. México.
- Shriner, R.L. 2013. Identificación sistemática de compuestos orgánicos. Segunda edición en español. Editorial Limusa Wiley. México.

Libros recientes del
Fondo Editorial

Arquitectura y ceremonia en Chan Chan
Cristóbal Campana

La sexualidad en el Antiguo Perú
Emiliano Paico Vilchez

Aportes de Trujillo a la independencia del Perú (vol. 4)
Eduardo Paz, Elmer Robles, Domingo Varas

Atlas de patología quirúrgica pediátrica
Juan Namoc Medina

El proceso de conocimiento
Teófilo Idrogo Delgado

Ciencia y tecnología de malezas
Luis A. Cerna Bazán

Historia del Derecho
Víctor H. Chanduví Cornejo

Cómo elegir maderas según los usos en Arquitectura y Construcción
Luis A. Gutierrez Pacheco

Más allá de los destinos
Guido Sánchez Santur

Francisco García Calderón entre dos mundos
Elmer Robles Ortiz

El libro *Química Orgánica, Teoría y Laboratorio* contiene los fundamentos y procedimientos experimentales para el desarrollo y comprensión de la química orgánica moderna, que todo estudiante de ciencias de salud e ingeniería requiere para la comprensión de asignaturas relacionadas, como bioquímica, farmacología, entre otros. Ofrece características concretas que facilitan su aprendizaje en corto tiempo, reforzado con prácticas de aula, para, de esta manera, adquirir la comprensión conceptual y las habilidades necesarias para solucionar problemas.

El libro comprende las siguientes secciones:

- Teoría: estructura, funciones orgánicas y biomoléculas.
- Prácticas experimentales: métodos de purificación, síntesis y espectroscopía IR.

UPAO | Fondo Editorial