

# QUÍMICA ORGANICA I

Florencia Grasso  
fgrasso@agro.unc.edu.ar

Grupos funcionales  
Aromaticidad

# GRUPOS FUNCIONALES

La estructura del esqueleto contribuye a parte de las propiedades físicas

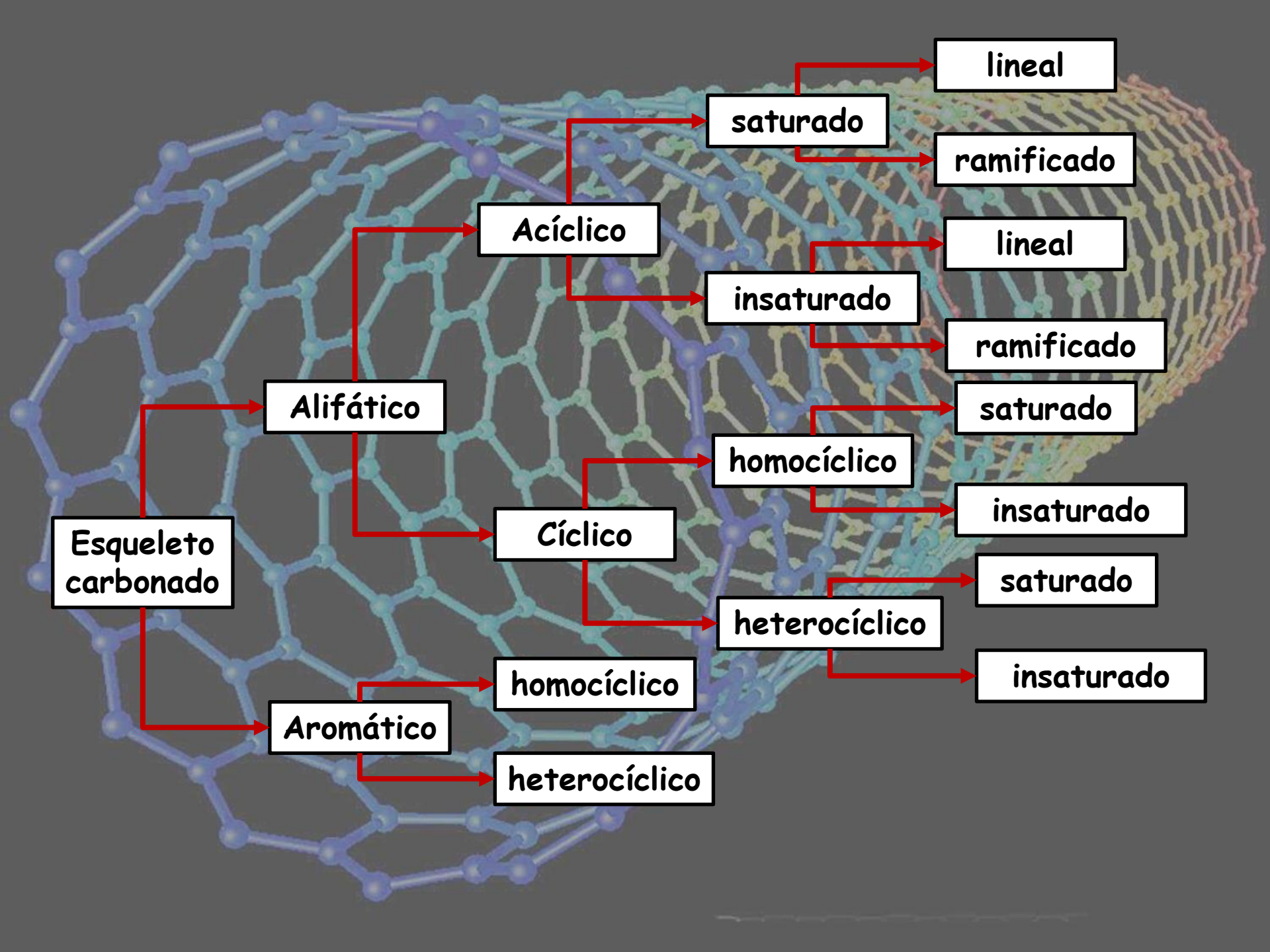
La estructura del grupo funcional determina:  
➤ Principales propiedades químicas  
➤ Parte de las propiedades físicas

esqueleto carbonado



grupo funcional

El punto de enlace determina:  
➤ Parte de las propiedades físicas  
➤ Parte de las propiedades químicas



**Esqueleto carbonado**

**Alifático**

**Aromático**

**Acíclico**

**Cíclico**

**homocíclico**

**heterocíclico**

**saturado**

**insaturado**

**homocíclico**

**heterocíclico**

**lineal**

**ramificado**

**lineal**

**ramificado**

**saturado**

**insaturado**


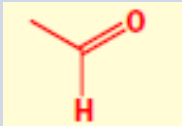
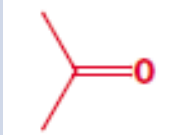
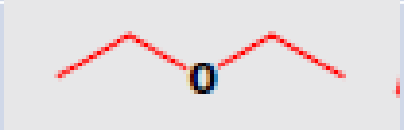
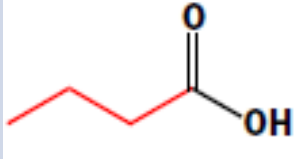
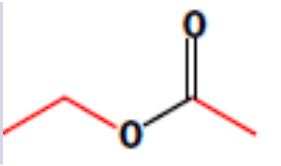
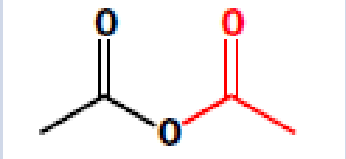
**saturado**

**insaturado**


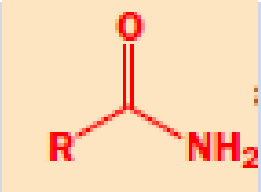
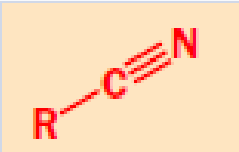
# FUNCIONES HIDROCARBONADAS

| GRUPO FUNCIONAL | ESTRUCTURA       | NOMBRE                 | ESTRUCTURA TÍPICA   |
|-----------------|------------------|------------------------|---|
| ALCANO          | Enlace simple    | Terminan en <b>ano</b> |    |
| ALQUENO         | Enlace doble     | Terminan en <b>eno</b> |    |
| ALQUINO         | Enlace triple    | Terminan en <b>ino</b> |   |
| ARENO           | Anillo aromático | ----                   |  |

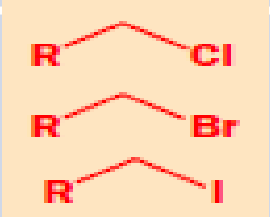
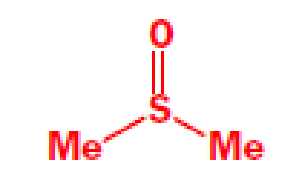
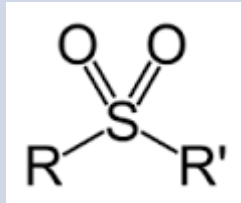
# FUNCIONES OXIGENADAS

| GRUPO FUNCIONAL | ESTRUCTURA                               | NOMBRE            | ESTRUCTURA TÍPICA   |
|-----------------|--|-------------------|---|
| HIDROXILO       | -OH                                      | ALCOHOL           |    |
| CARBONILO       | $\begin{array}{c} -C=O \\   \end{array}$ | ALDEHÍDO          |    |
|                 |  | CETONA            |    |
| ALCOXI          | -O-                                      | ÉTER              |    |
| CARBOXILO       | -COOH                                    | ÁCIDO CARBOXÍLICO |   |
| ACILO           | -COO-                                    | ESTER             |  |
|                 |  | ANHÍDRIDO         |  |

# FUNCIÓNES NITROGENADAS

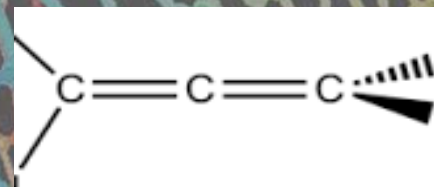
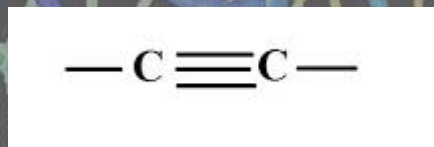
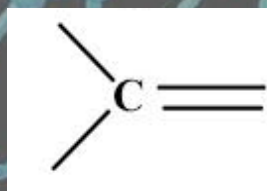
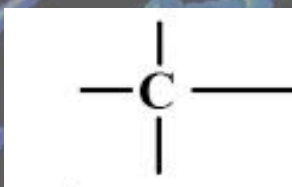
| GRUPO FUNCIONAL | ESTRUCTURA                                | NOMBRE                   | ESTRUCTURA TÍPICA  |
|-----------------|---|--------------------------|--|
| AMINO           | $\begin{array}{c} -N- \\   \end{array}$   | AMINA                    |   |
| CARBOXIAMIDA    | $\begin{array}{c} -CON- \\   \end{array}$ | AMIDA                    |   |
| NITRO           | $-NO_2$                                   | NITROCOMPUESTO           | $CH_3NO_2$   |
| NITRILO         | $-CN$                                     | NITRILO                  |  |
| ISOCIANURO      | $-NC$                                     | ALQUIL O ARIL ISOCIANURO | $R-N^+ \equiv C^-$   |
| ISOCIANATO      | $-NCO$                                    | ALQUIL O ARIL ISOCIANATO | $R-N=C=O$  |

# OTRAS FUNCIONES

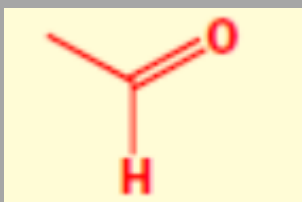
| GRUPO FUNCIONAL | ESTRUCTURA  | NOMBRE                         | ESTRUCTURA TÍPICA   |
|-----------------|---|--------------------------------|---|
| HALÓGENO        | $\text{X-}$ Donde X: F, Cl, Br ó I  | Halogenuros de Alquilo o Arilo |    |
| SULFURO         | $- \text{S} -$  | Sulfuro de alquilo o arilo     |    |
| TIOL            | $- \text{S}-\text{H}$   | Tiol                           | $\text{H}_3\text{C} - \text{CH}_2 - \text{SH}$  |
| SULFÓXIDO       | $  \begin{array}{c}  \text{- S=O} \\     \end{array}  $                         | Sulfóxido                      |   |
| SULFONA         | $  \begin{array}{c}    \\  \text{O} = \text{S} = \text{O} \\     \end{array}  $ | Sulfona                        |  |

# Puntos de unión de los grupos funcionales

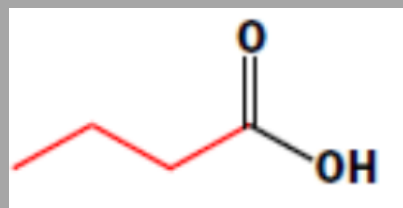
Hay cuatro posibles maneras de enlazar al carbono con otro átomo:



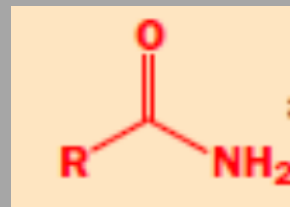
## □ Grupos funcionales terminales



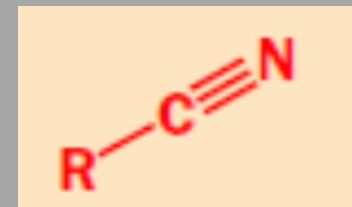
Aldehído



Acido carboxílico



Amida

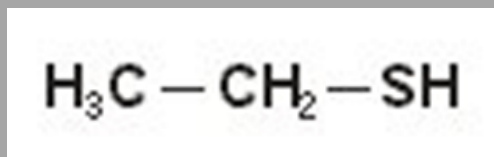


Nitrilo

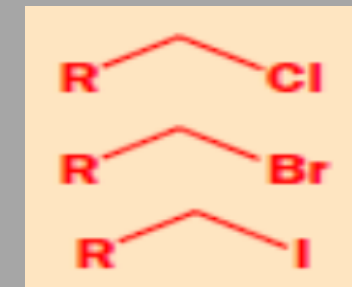
## □ Grupos funcionales terminales y no terminales



Alcoholes



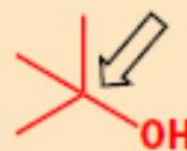
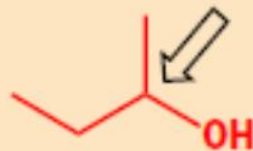
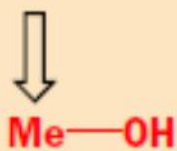
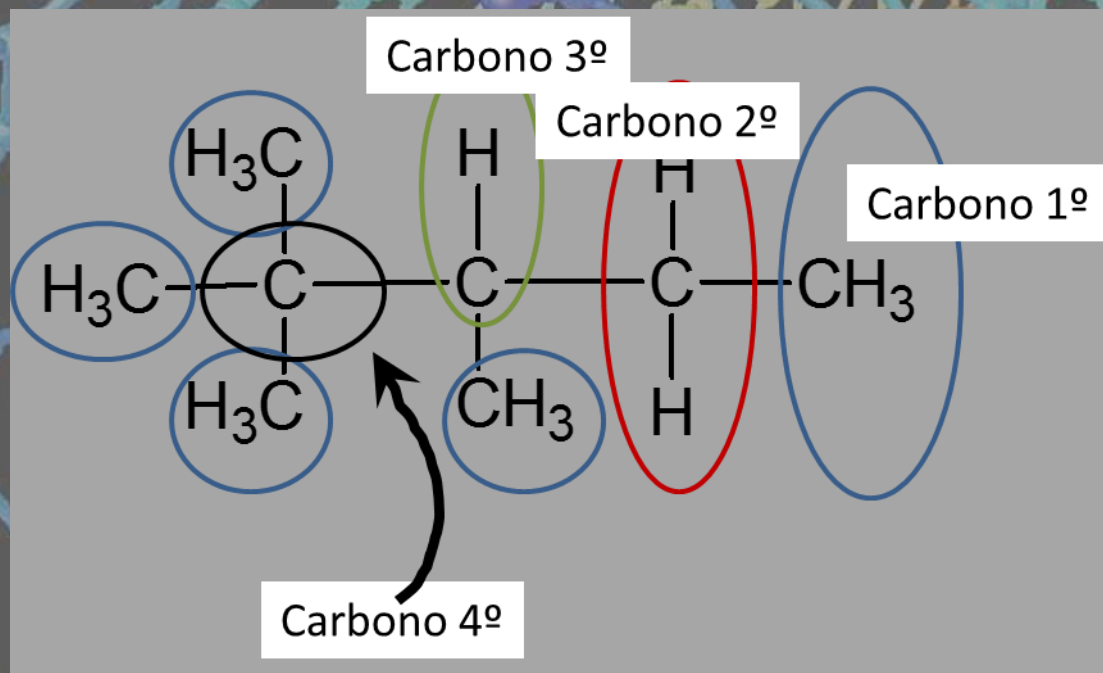
Tioles



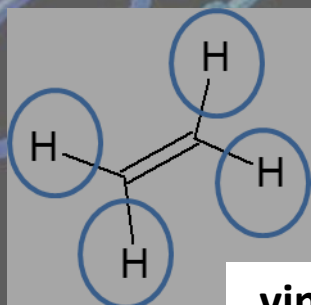
Halogenuros



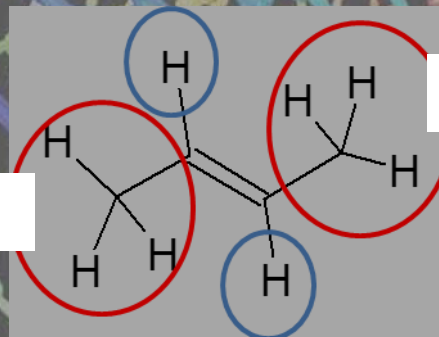
# Puntos de unión de los grupos funcionales



# Puntos de unión de los grupos funcionales



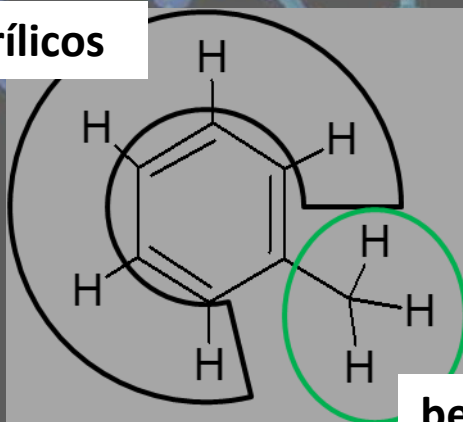
vinílicos



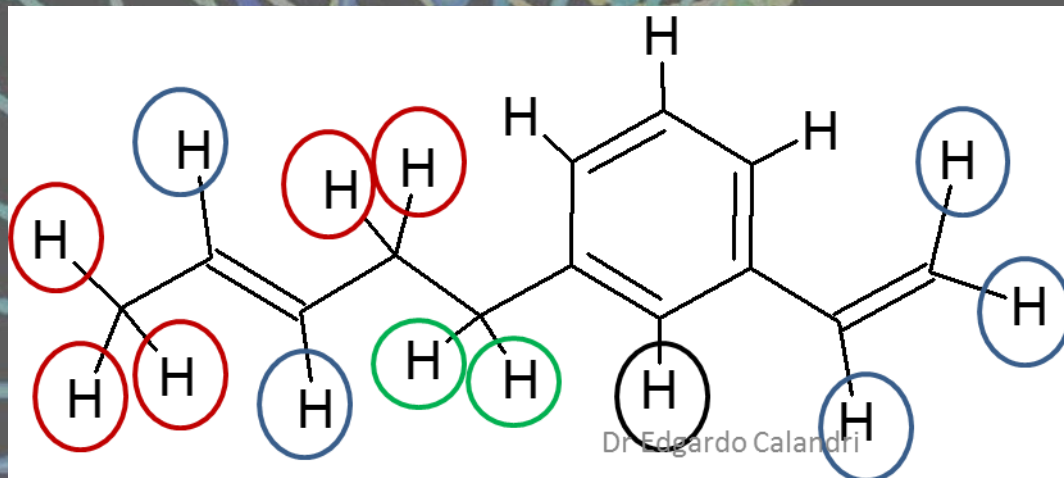
alílicos

alílicos

arílicos

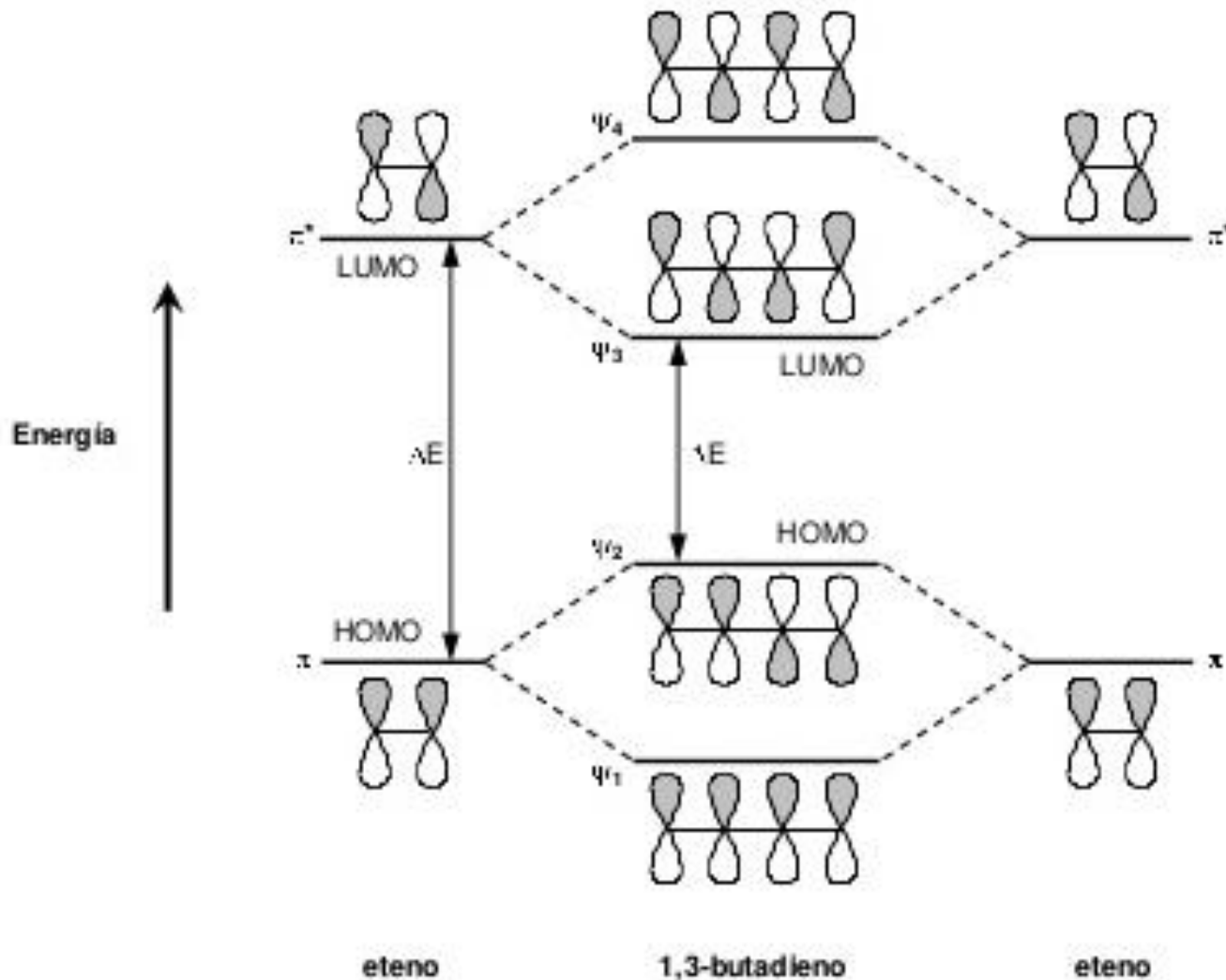


bencílicos

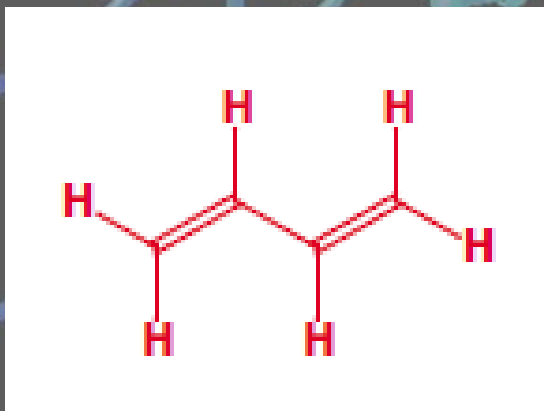


Dr. Edgardo Calandri

# DESLOCALIZACIÓN Y CONJUGACIÓN



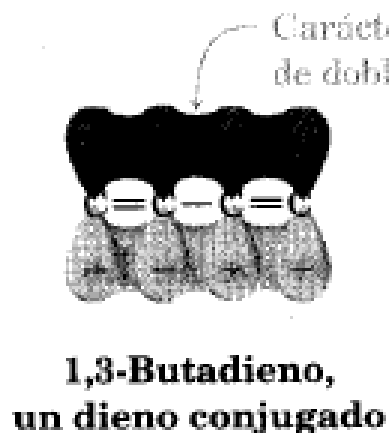
# CONJUGACIÓN Y ESTABILIDAD



butadieno



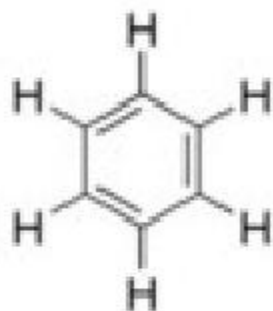
MAS ESTABLE



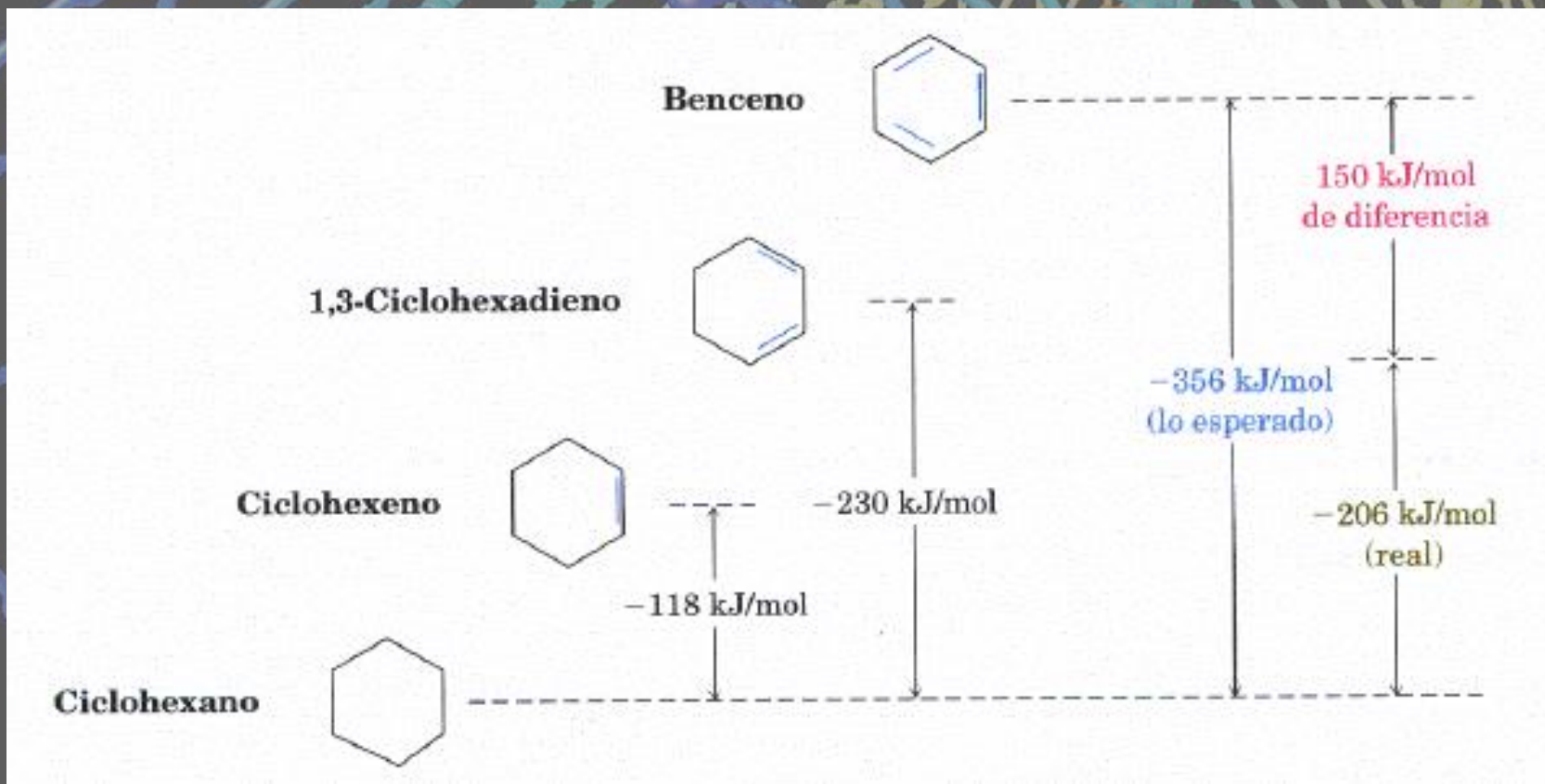
- ❑ El orbital molecular de enlace  $\Psi_1$  es más estable que el orbital de enlace en el caso de enlaces aislados.
- ❑ Los electrones están deslocalizados.

# AROMATICIDAD

- ❑ Compuestos "aromáticos": derivados del benceno
- ❑ Benceno: hidrocarburo con propiedades distintas de los alquenos.
- ❑ No reacciona en reacciones de adición electrofílica.
- ❑ Sufre reacciones de sustitución electrofílica (conservando su carácter anular e insaturado).
- ❑ Más estable que los alquenos equivalentes.
- ❑ Los 6 enlaces del benceno son de la misma longitud.
- ❑ La geometría molecular es trigonal planar.

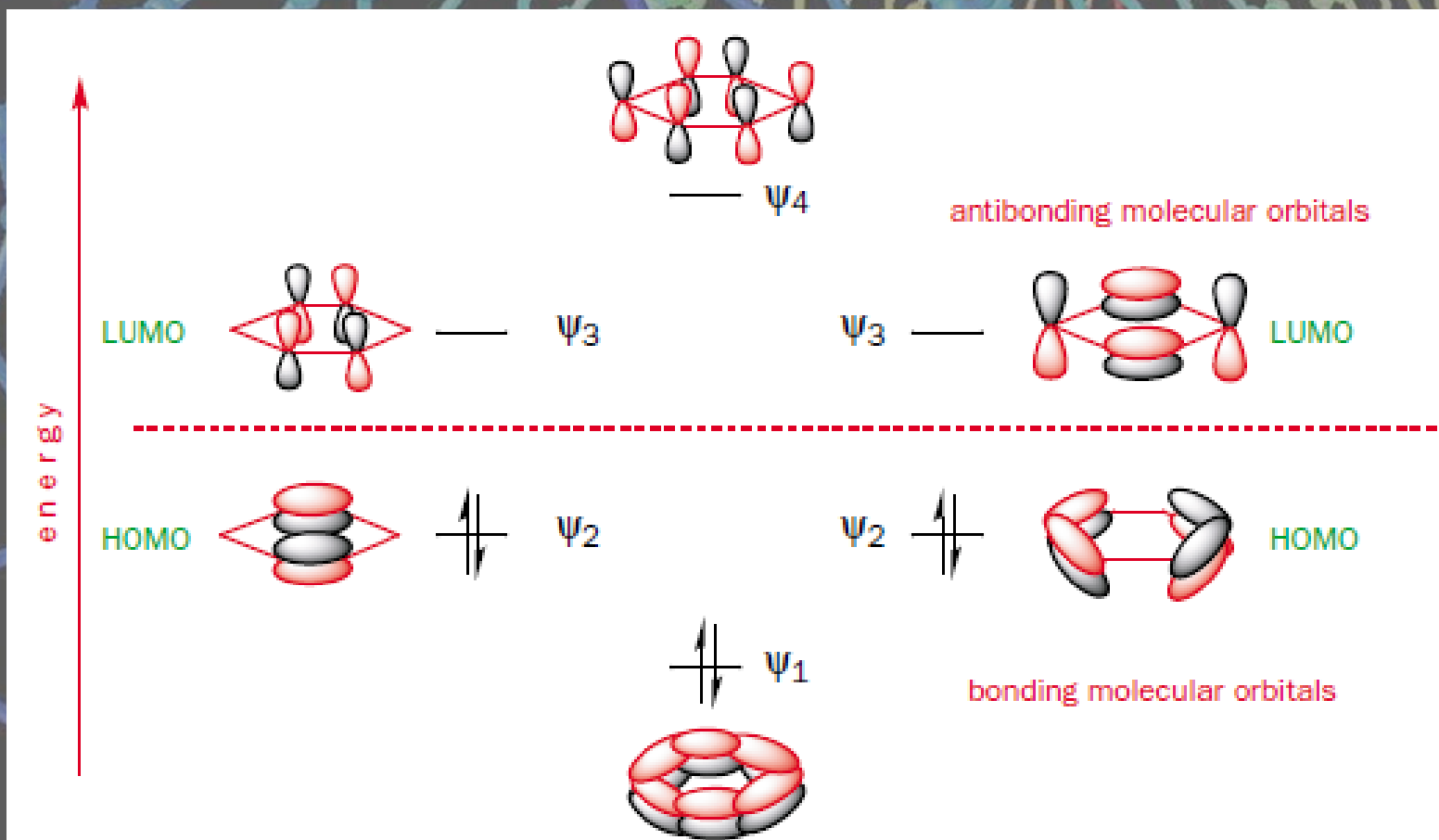


# AROMATICIDAD



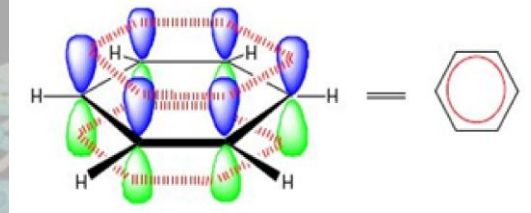
Comparación de los calores de hidrogenación del 1,3,5-hexatrieno y el benceno

# AROMATICIDAD



Modelo del anillo de 6 átomos conjugados

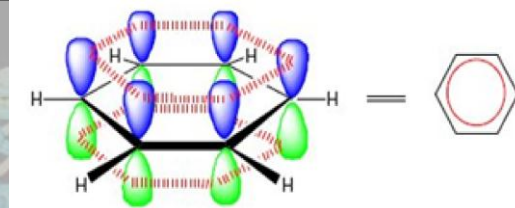
# AROMATICIDAD



- El benceno posee un orbital enlazante de menor energía.
- Tiene 2 orbitales enlazantes de energía más elevada (degenerados).
- El número de orbitales enlazantes es siempre impar.
- Un enlazante ocupará el sitio de menor energía.
- Los restantes se distribuirán de a pares en orden ascendente de energía.
- El total de electrones p resulta de sumar 2 (electrones de menor energía) más 4 por cada par de orbitales degenerados.
- Regla de Hückel:  $p = 4n + 2$ , donde  $n$  es un número entero  $\geq 1$  o cero.



# AROMATICIDAD



## Condiciones para ser aromático:

- Molécula cíclica.
- Plana (se deben poder solapar los orbitales).
- Sistema  $\pi$  conjugado (todos los átomos del ciclo deben poseer un orbital p).
- Cumplir con la regla de Regla de Hückel:  
 $\pi = 4n + 2$ , donde  $n$  es un número entero  $\geq 1$  ó  $0$ .

# Ejemplos: ¿cuáles son aromáticas?

- $8e \neq 4n+2$ : no cumple
- **No es aromático**



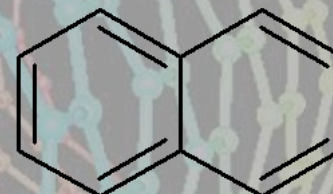
Ciclobutadieno



Ciclooctatetraeno



Ciclopentadieno



Naftaleno



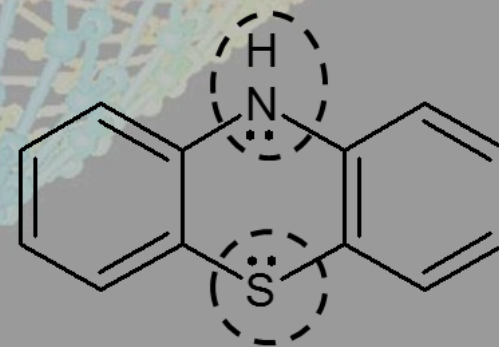
Cicloheptatrieno



Furano



Pirrol



10H-Fenotiazina

- $6e = 4x1+2$ : cumple
- Pero no es completamente conjugado
- **No es aromático**

- $6e = 4x1+2$ : cumple, el O aporta 2 e
- **Es aromático**

- $6e = 4x1+2$ : cumple, el N aporta 2 e
- **Es aromático**

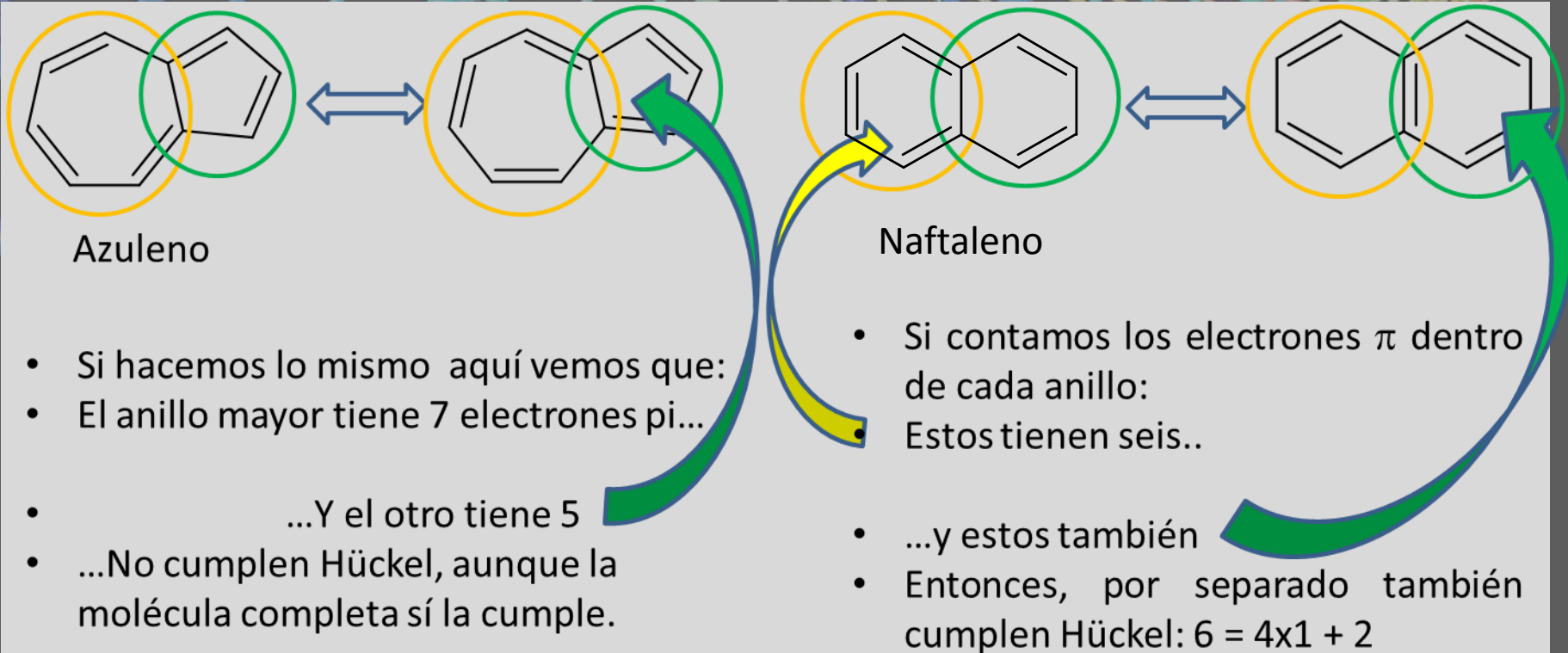
- $16e \neq 4n+2$ : no cumple
- **No es aromático**

- $4e \neq 4n+2$ : no cumple
- **No es aromático**

- $10e = 4n+2$ : cumple
- **Es aromático**

# AROMATICIDAD

El azuleno es un isómero estructural del naftaleno. Ambas estructuras son aromáticas. Se observa que, mientras el naftaleno posee momento dipolar nulo, en el azuleno asciende a 1,0 D. ¿Qué explicación podemos dar?





**Muchas gracias!!**