



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

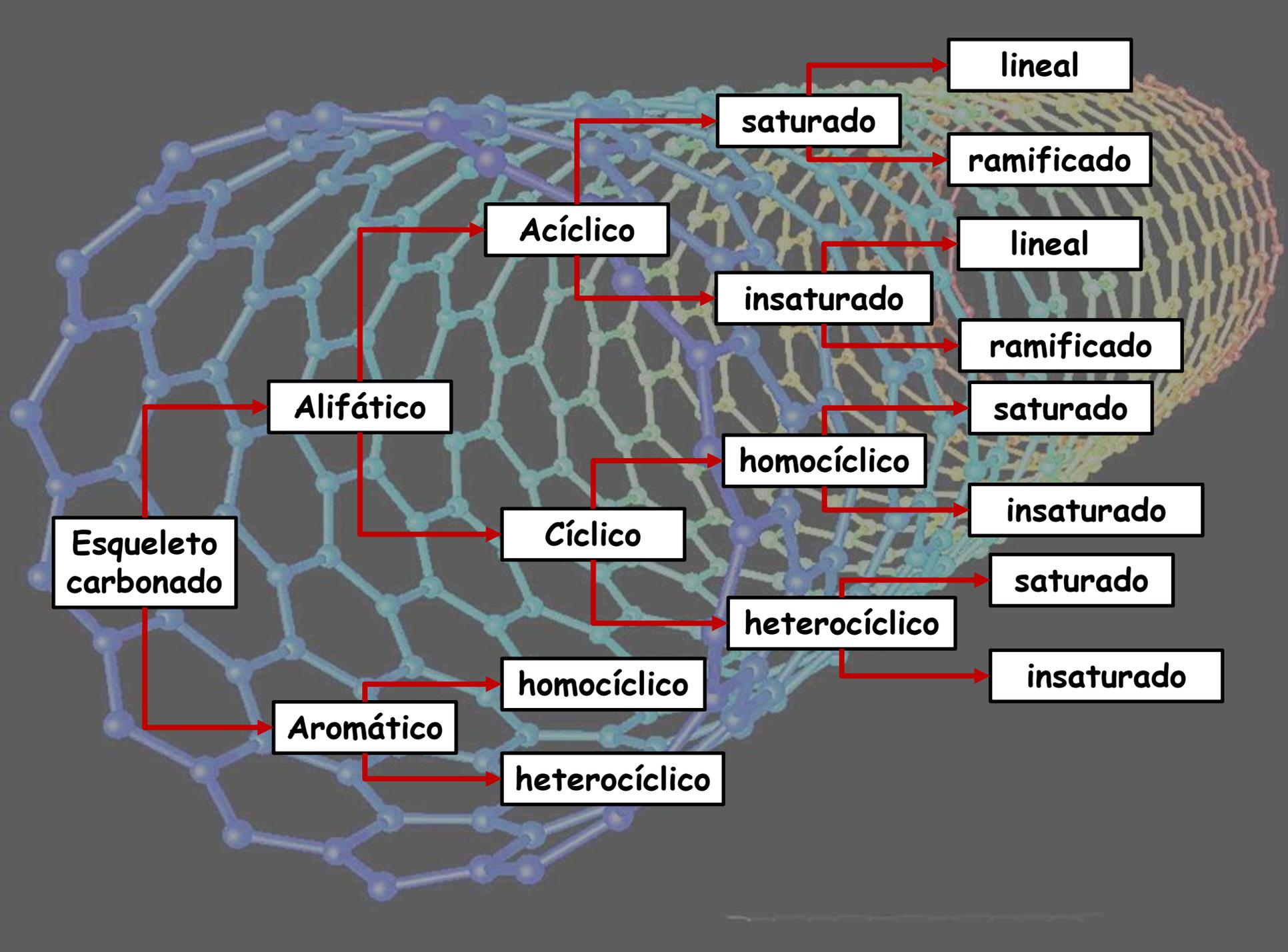
esqueleto carbonado



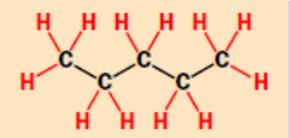
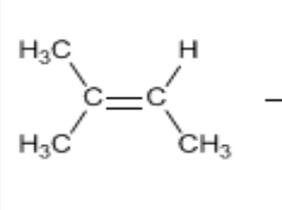
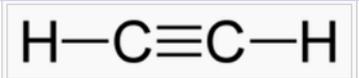
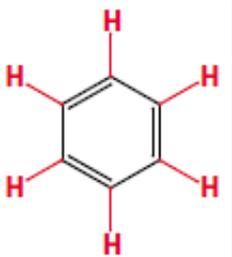
grupo funcional

El punto de enlace determina:

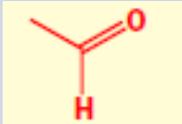
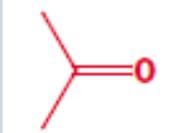
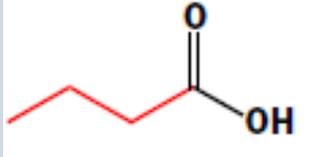
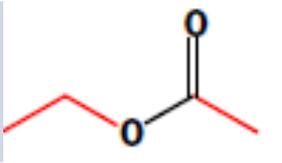
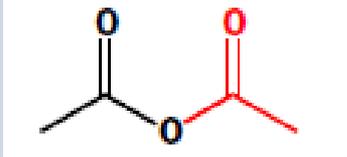
- Parte de las propiedades físicas
- Parte de las propiedades químicas



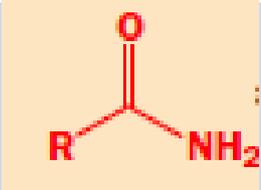
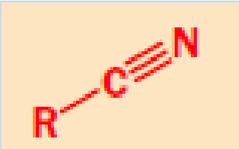
FUNCIONES HIDROCARBONADAS

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

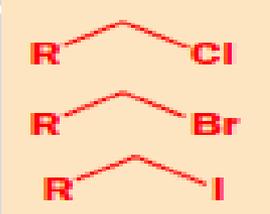
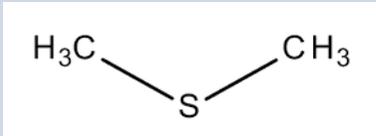
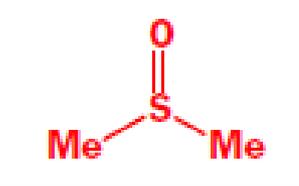
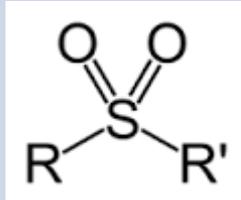
FUNCIONES OXIGENADAS

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

FUNCIÓNES NITROGENADAS

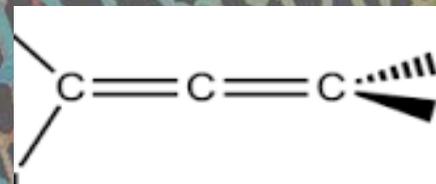
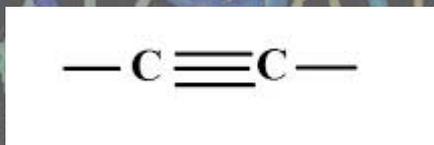
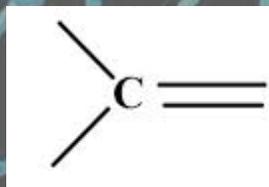
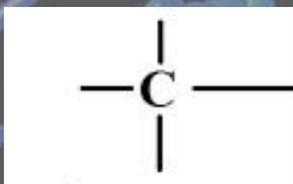
GRUPO FUNCIONAL	ESTRUCTURA	NOMBRE	ESTRUCTURA TÍPICA
AMINO	$\begin{array}{c} -N- \\ \end{array}$	AMINA	
CARBOXIAMIDA	$\begin{array}{c} -CON- \\ \end{array}$	AMIDA	
NITRO	$-NO_2$	NITROCOMPUESTO	CH_3NO_2
NITRILO	$-CN$	NITRILO	
ISOCIANURO	$-NC$	ALQUIL O ARIL ISOCIANURO	$R-N^+ \equiv C^-$
ISOCIANATO	$-NCO$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

OTRAS FUNCIONES

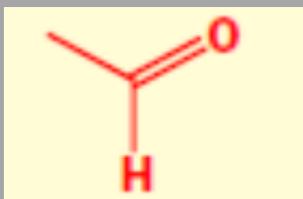
GRUPO FUNCIONAL	ESTRUCTURA	NOMBRE	ESTRUCTURA TÍPICA
HALÓGENO	X- Donde X: F, Cl, Br ó I	Halogenuros de Alquilo o Arilo	
SULFURO	$- \text{S} -$	Sulfuro de alquilo o arilo	
TIOL	$- \text{S}-\text{H}$	Tiol	$\text{H}_3\text{C} - \text{CH}_2 - \text{SH}$
SULFÓXIDO	$ \begin{array}{c} \text{- S=O} \\ \end{array}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

Puntos de unión de los grupos funcionales

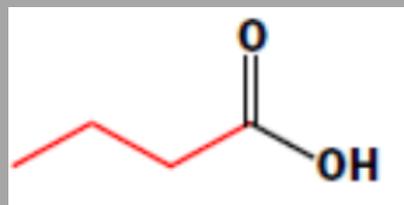
Hay cuatro posibles maneras de enlazar al carbono con otro átomo:



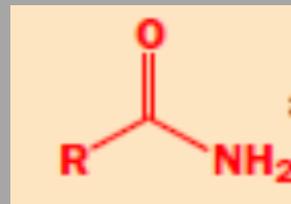
□ Grupos funcionales terminales



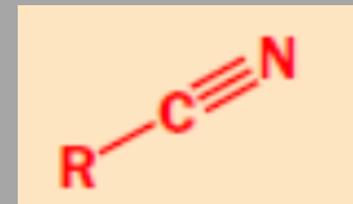
Aldehído



Acido carboxílico



Amida

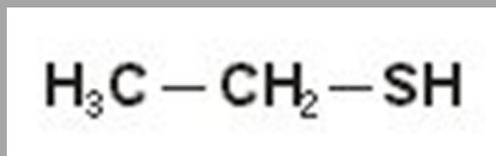


Nitrilo

□ Grupos funcionales terminales y no terminales



Alcoholes

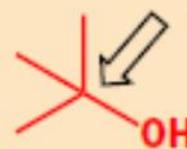
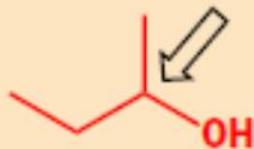
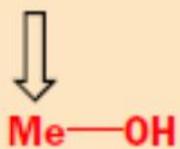
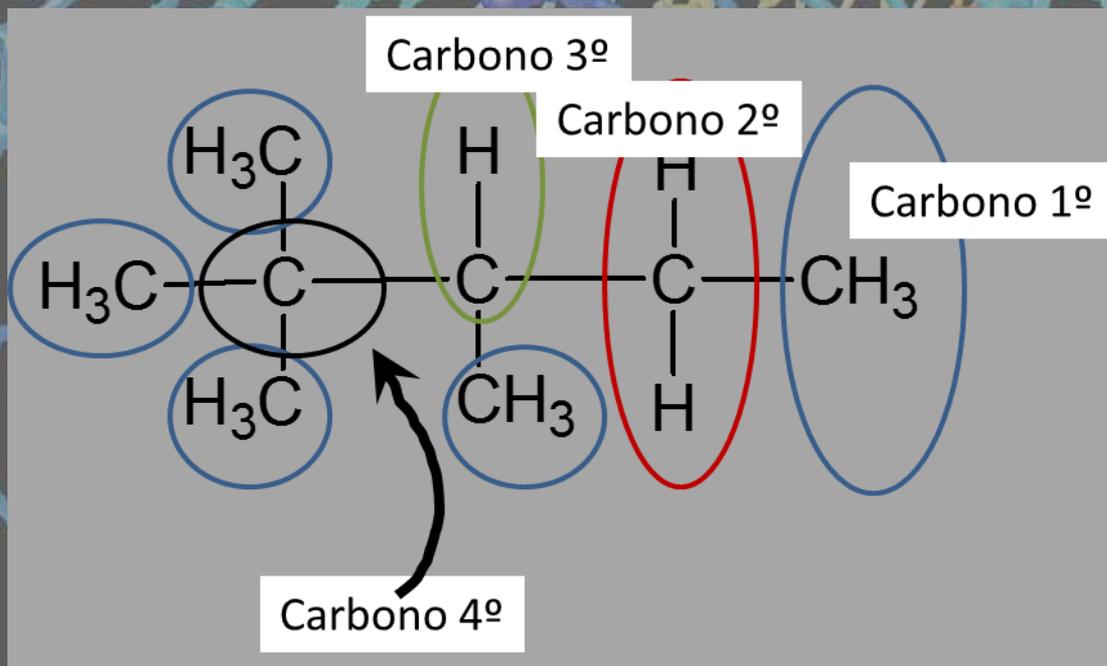


Tioles

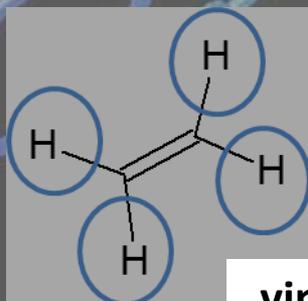


Halogenuros

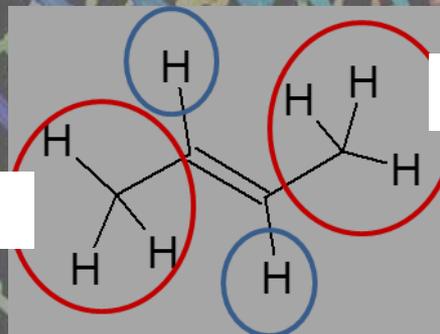
Puntos de unión de los grupos funcionales



Puntos de unión de los grupos funcionales



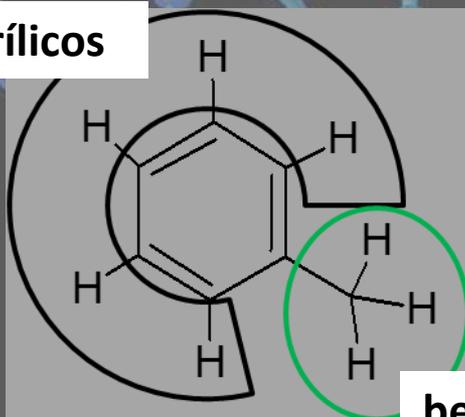
vinílicos



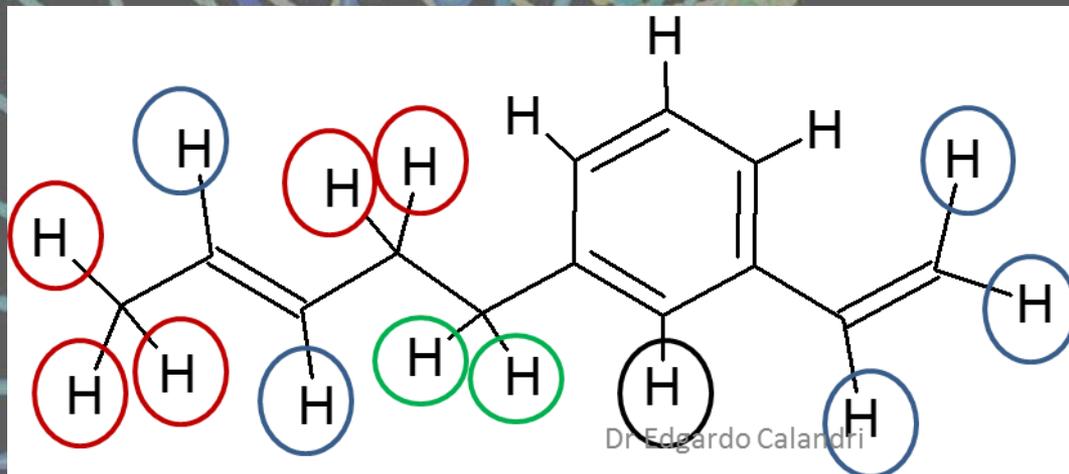
alílicos

alílicos

arílicos

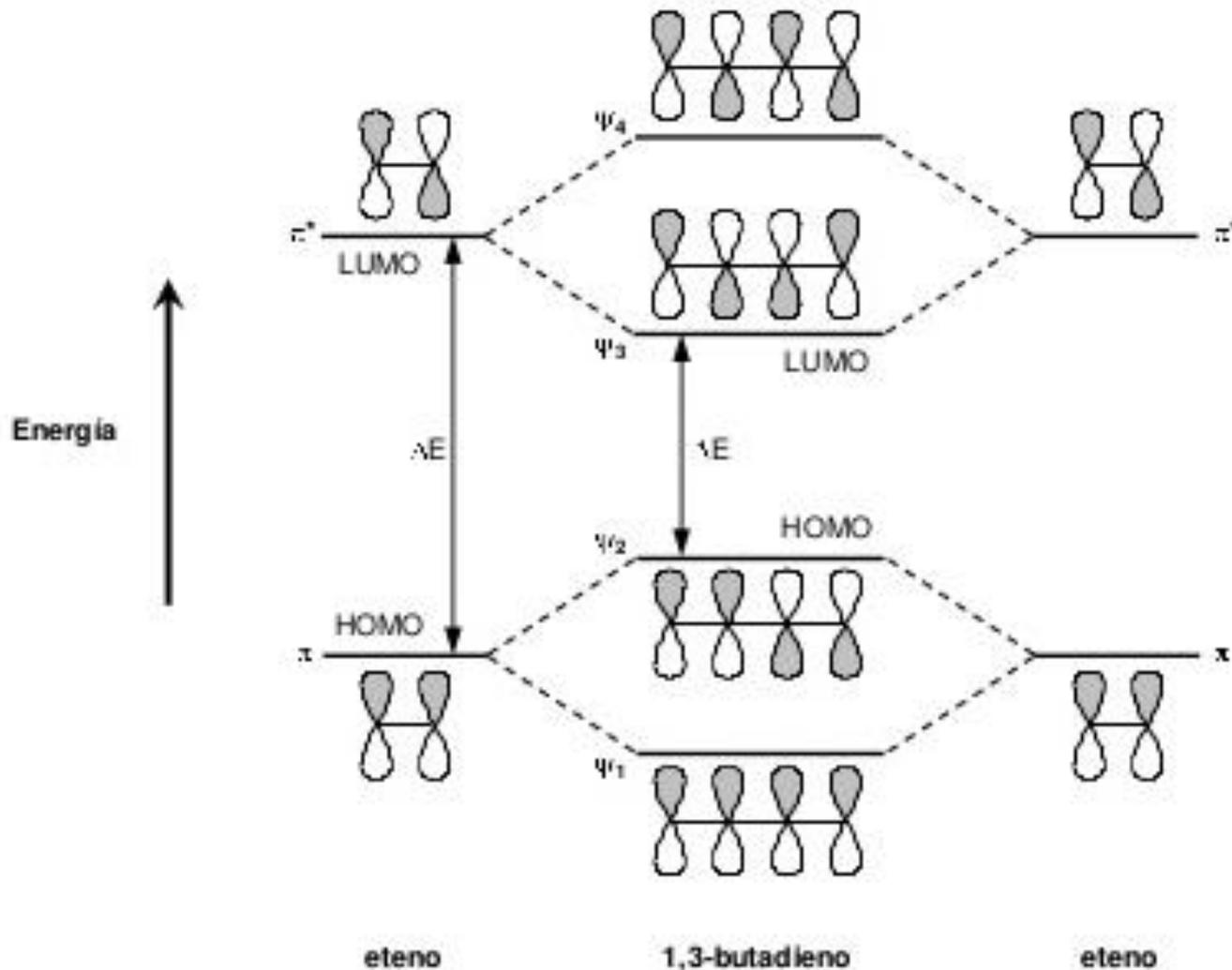


bencílicos

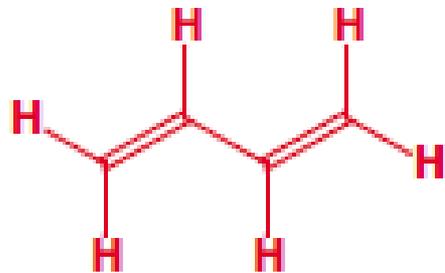


Dr. Edgardo Calandri

DESLOCALIZACIÓN Y CONJUGACIÓN



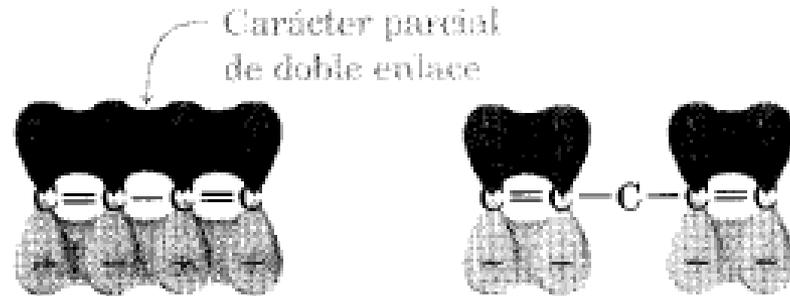
CONJUGACIÓN Y ESTABILIDAD



butadieno



MAS ESTABLE



1,3-Butadieno,
un dieno conjugado

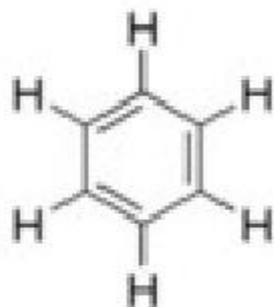
1,4-Pentadieno,
un dieno no conjugado



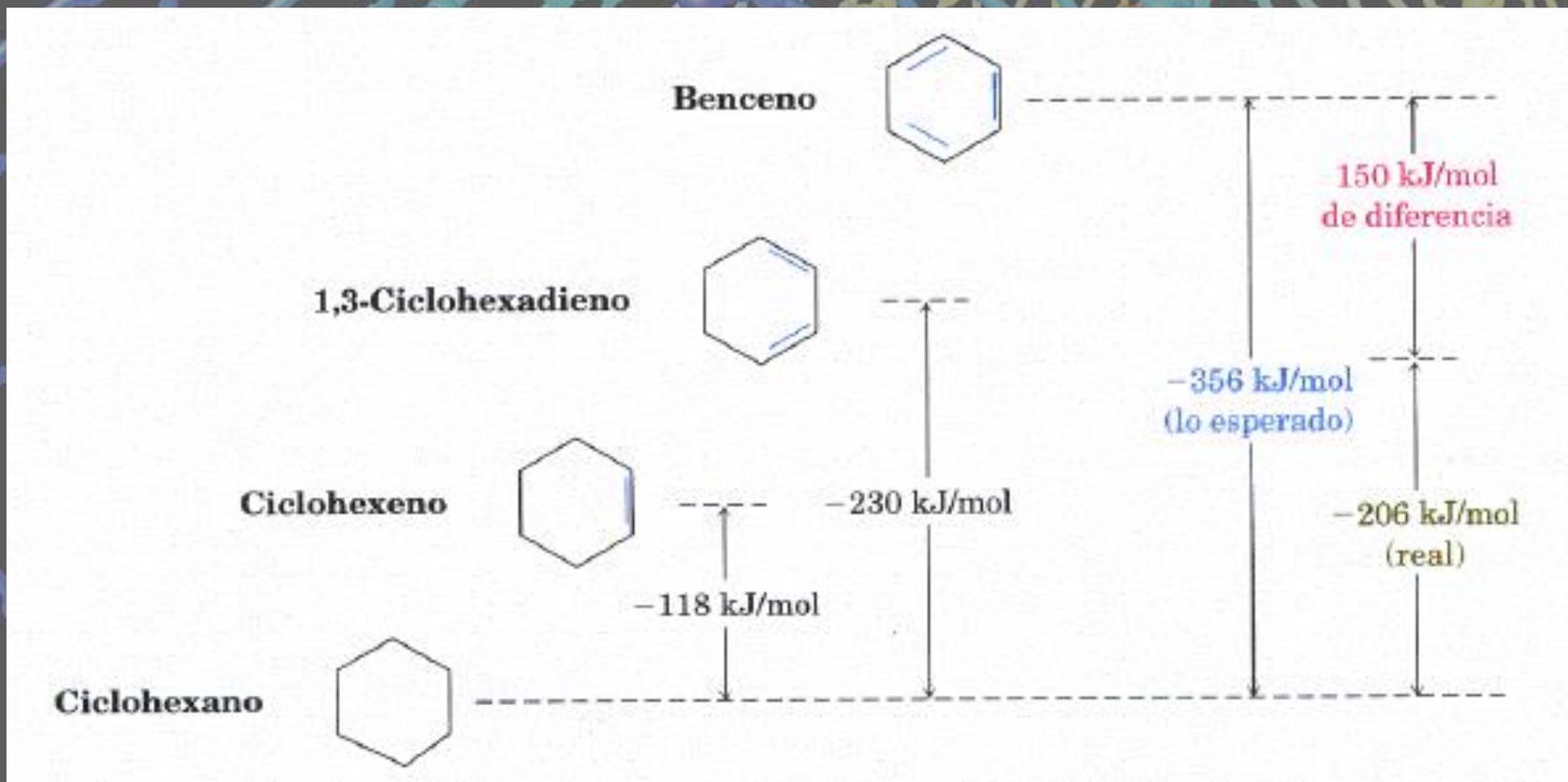
- ❑ El orbital molecular de enlace Ψ_1 es más estable que el orbital de enlace en el caso de enlaces aislados.
- ❑ Los electrones están deslocalizados.

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.

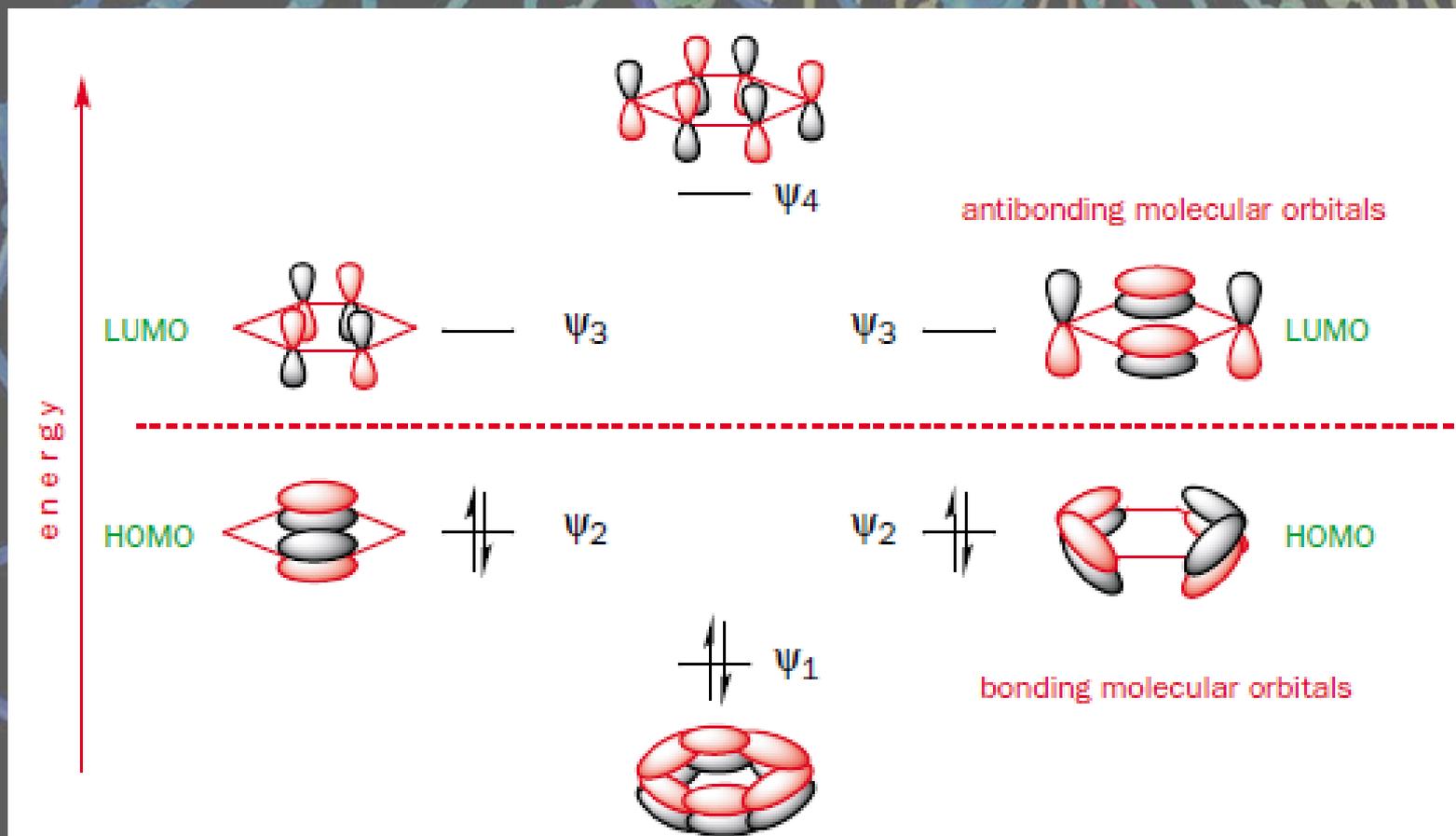


AROMATICIDAD



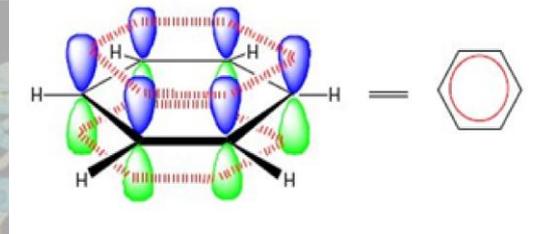
Comparación de los calores de hidrogenación del 1,3,5-hexatrieno y el benceno

AROMATICIDAD



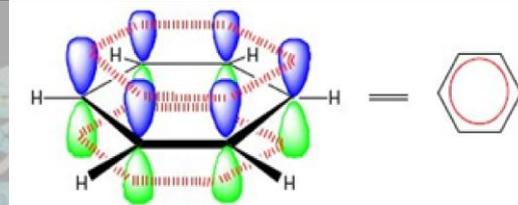
Modelo del anillo de 6 átomos conjugados

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 ≥ 1 o cero.

AROMATICIDAD

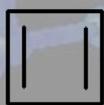


Condiciones para ser aromático:

- Molécula cíclica.
- Plana (se deben poder solapar los orbitales).
- Sistema π 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 ≥ 1 ó 0 .

Ejemplos: ¿cuáles son aromáticas?

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



Ciclobutadieno



Ciclooctatetraeno



Ciclopentadieno



Naftaleno



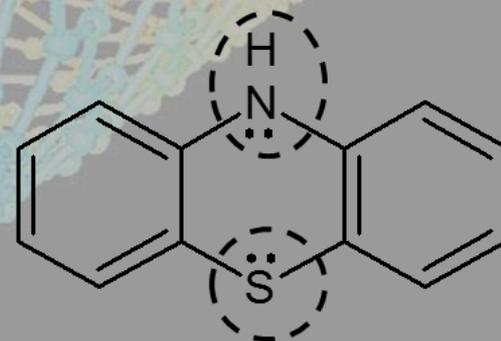
Cicloheptatrieno



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**

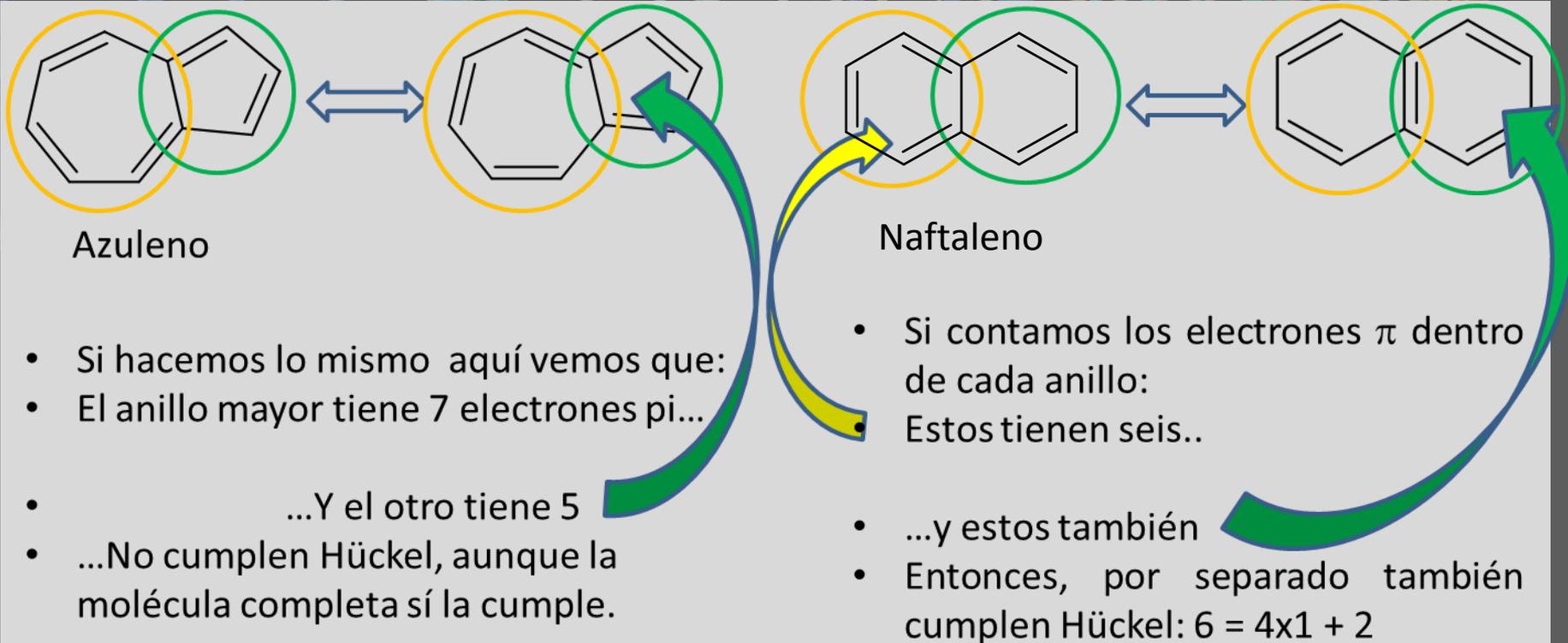
- $16e \neq 4n+2$: no cumple
- **No es aromático**

- $4e \neq 4n+2$: 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!!