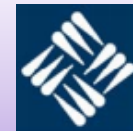


2.1 Representación de moléculas

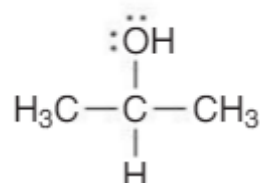


Existen diferentes métodos para representar las moléculas

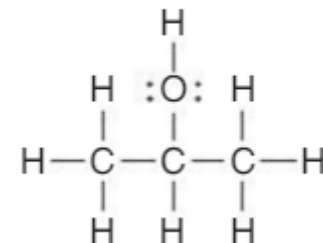
Ej. 2-propanol

$\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$ Fórmula molecular

$(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ Estructura condensada

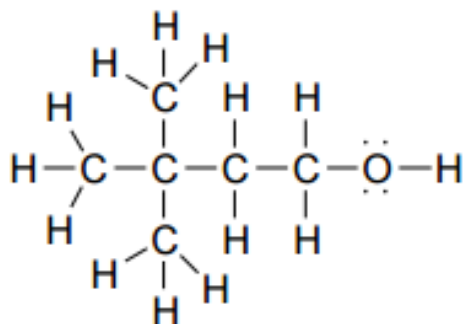


Estructura parcialmente condensada

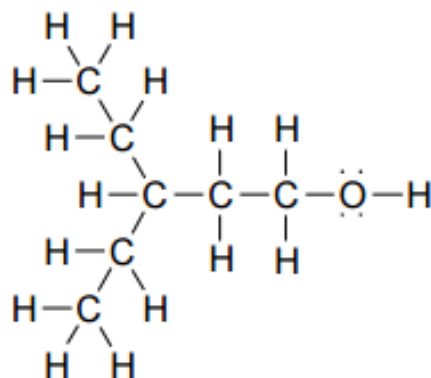


Estructura de Lewis

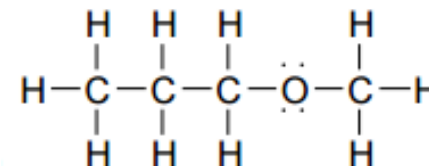
$(\text{CH}_3)_3\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$



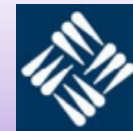
$(\text{CH}_3\text{CH}_2)_2\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$



$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$



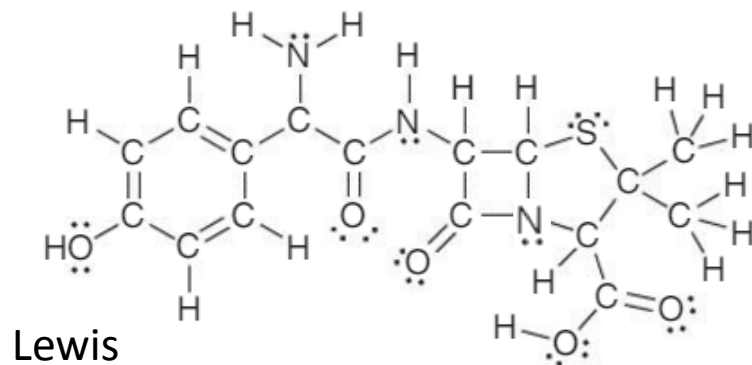
2.1 Representación de moléculas



Representación más cómoda, en relación complicación/información

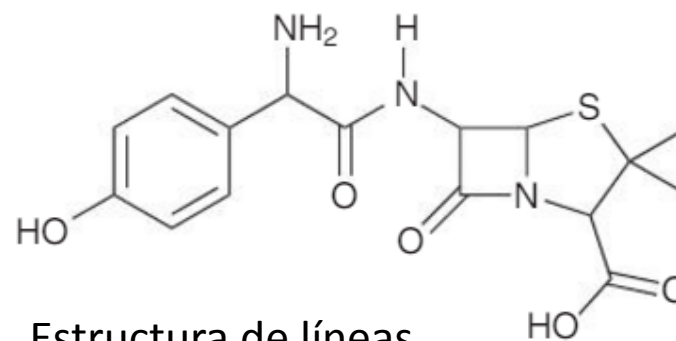


Estructura de líneas



Lewis

Amoxicilina



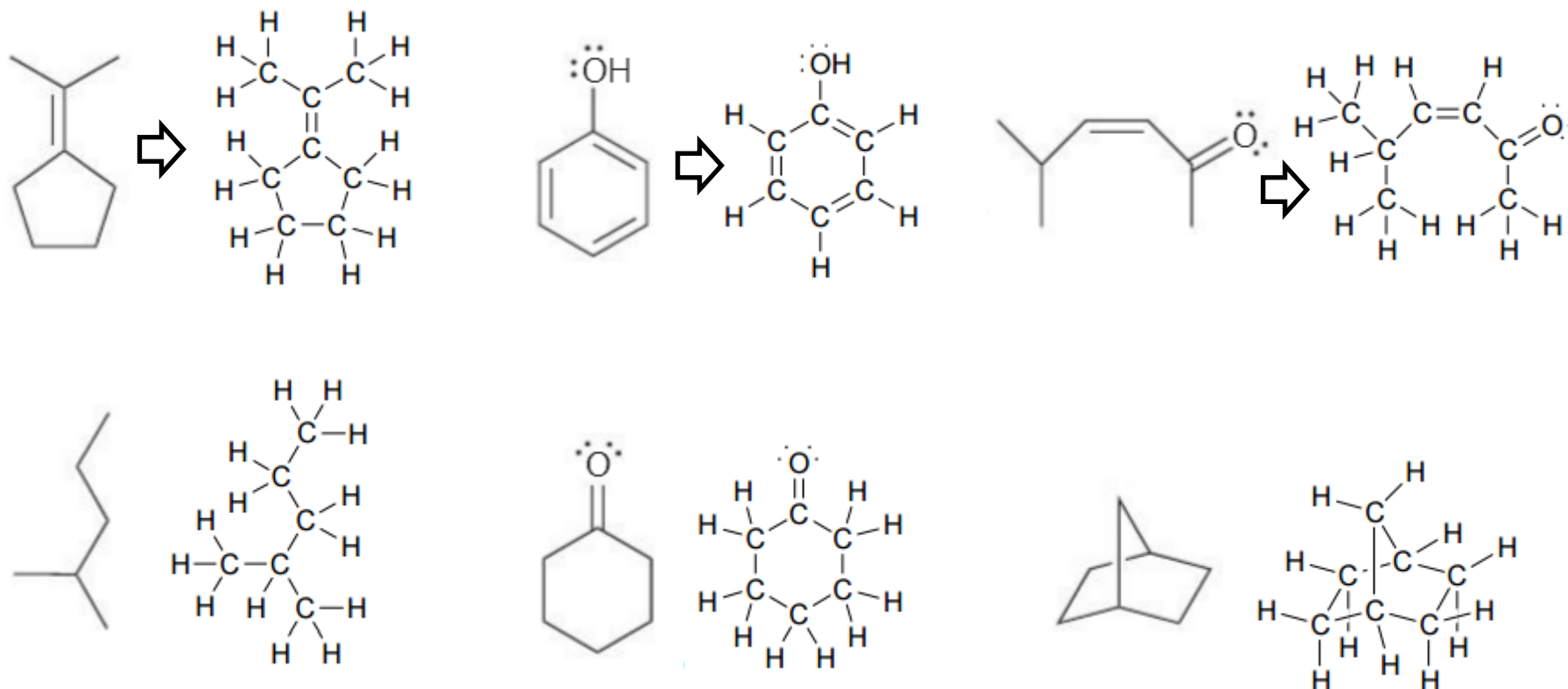
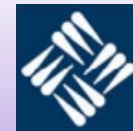
Estructura de líneas

No se muestran átomos de Carbono, están representados por cada uno de los extremos de las líneas, ni se muestran Hidrógenos unidos a átomos de carbono

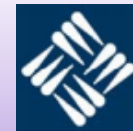
Muchos menos trazos, misma información pero más clara y visible

La mayoría de las veces utilizaremos este tipo de representación

2.1 Representación de moléculas

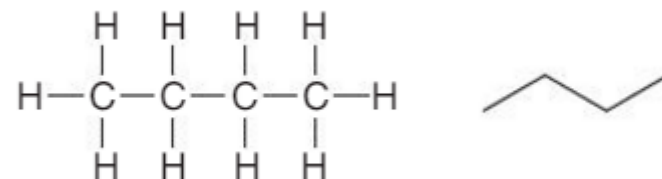


Coger soltura con la representación esquemática (de líneas) es indispensable para ir trabajando con las moléculas

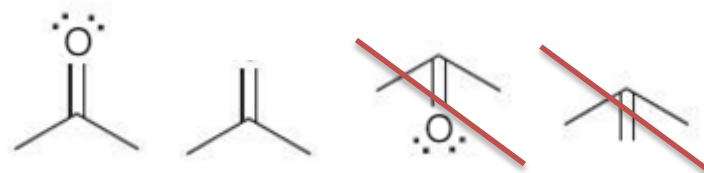


Como dibujar con estructura de líneas:

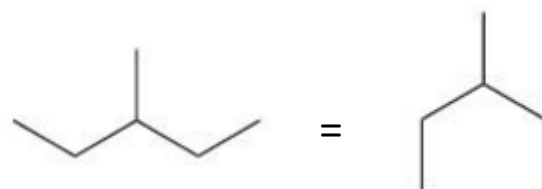
1. Los átomos de una cadena se representan en zigzag



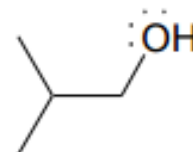
2. Los dobles enlaces se dibujan con ángulos de 120°



3. Con enlaces simples la dirección es irrelevante

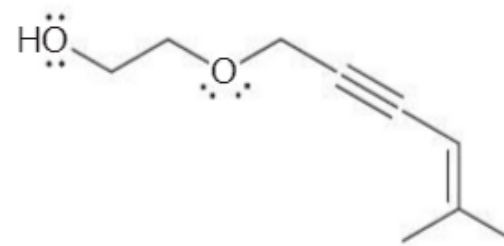
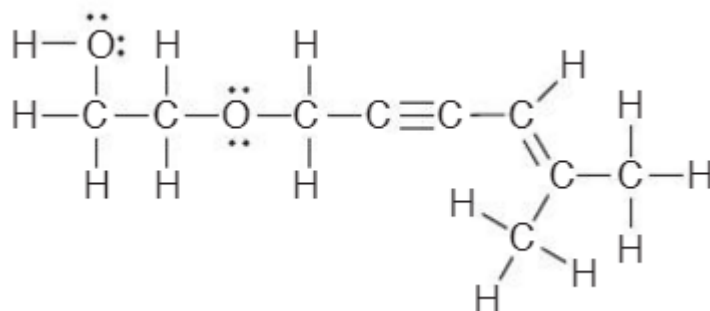
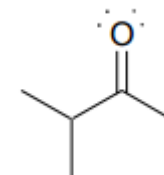
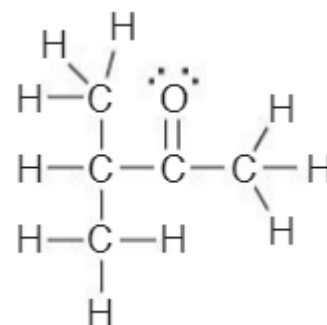
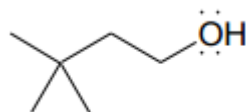
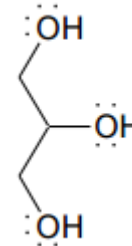
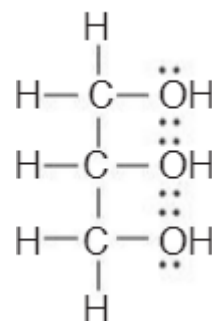
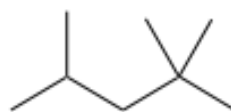
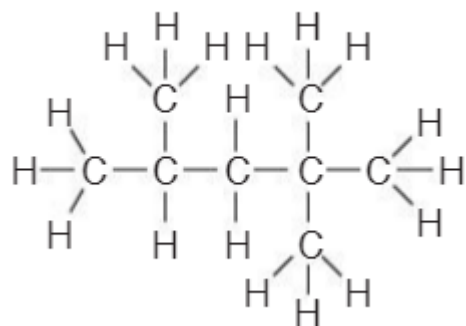
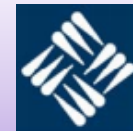


4. Se dibujan todos los **heteroátomos** (ni carbono ni hidrógeno) y deben dibujarse los hidrógenos unidos a heteroátomos



5. Nunca dibujamos un átomo de carbono con 5 enlaces, sólo hay 4 orbitales para acoger electrones

2.1 Representación de moléculas





2.2 Grupos funcionales

Un grupo funcional (G.F.) es:

Un grupo característico de átomos o enlaces que posee un comportamiento químico predecible

Derivado halogenado

Enlace múltiple

Carbonilo

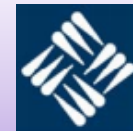
Oxígeno

Nitrógeno

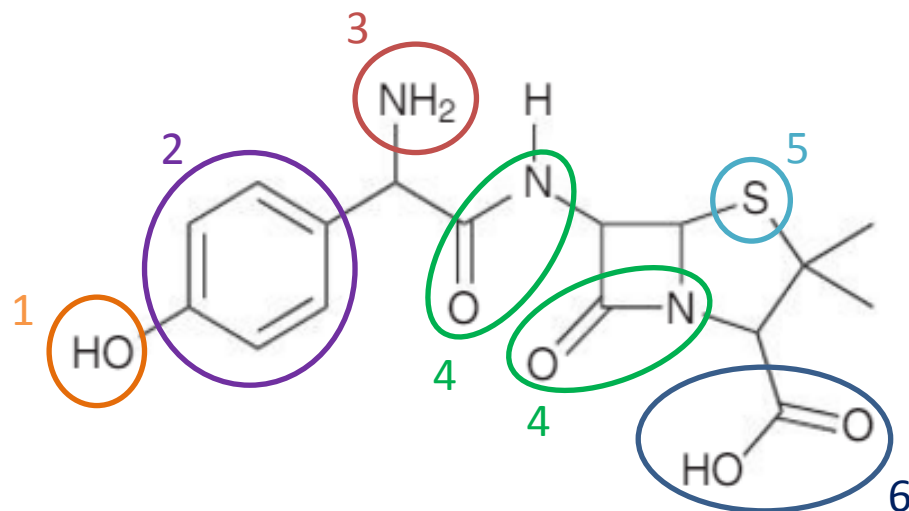
Azufre

GRUPO FUNCIONAL	CLASIFICACIÓN	EJEMPLO	GRUPO FUNCIONAL	CLASIFICACIÓN	EJEMPLO
$R-X$ (X=Cl, Br o I)	Halogenuro de alquilo	 Cloruro de n-propilo	 Cetona	 2-butanona	
 $R_2C=CR_2$	Alqueno	 1-buteno	 Aldehído	 Butanal	
$R-C\equiv C-R$	Alquino	 1-butino	 Ácido carboxílico	 Ácido pentanoico	
$R-OH$	Alcohol	 1-butanol	 Haluro de acilo	 Cloruro de acetilo	
$R-O-R$	Éter	 Dietil-éter	 Anhídrido	 Anhídrido acético	
$R-SH$	Tiol	 1-butanotiol	 Éster	 Acetato de etilo	
$R-S-R$	Sulfuro	 Dietil sulfuro	 Amida	 Butanamida	
	Aromático (o areno)	 Metilbenceno	 Amina	 Dietilamina	

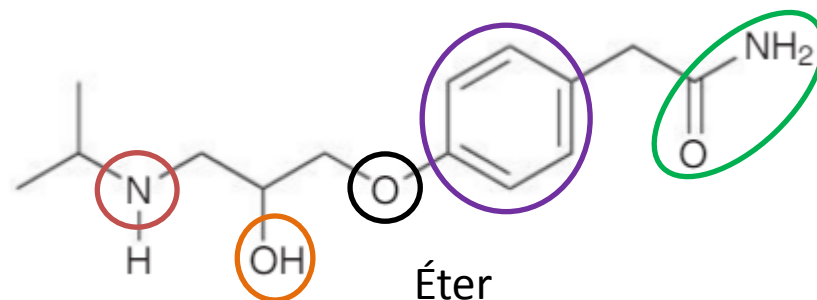
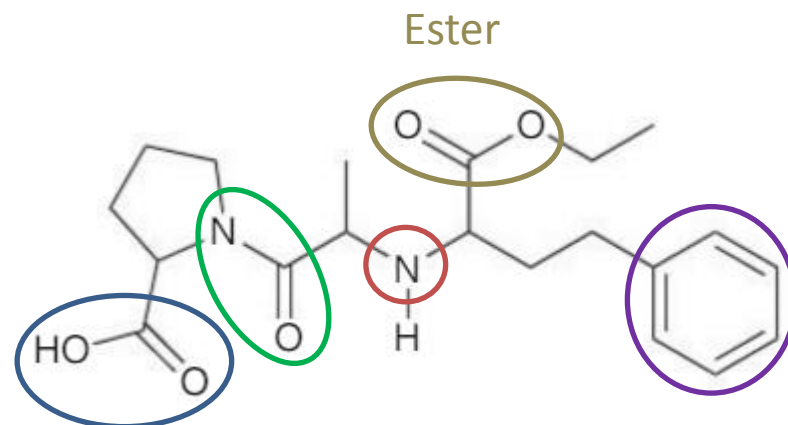
2.2 Grupos funcionales



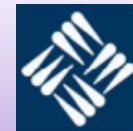
La representaciones esquemáticas son ideales para reconocer grupos funcionales (G.F.)



1. Alcohol
2. Anillo aromático
3. Amina
4. Amida
5. Sulfuro o Tioéter
6. Acido carboxílico



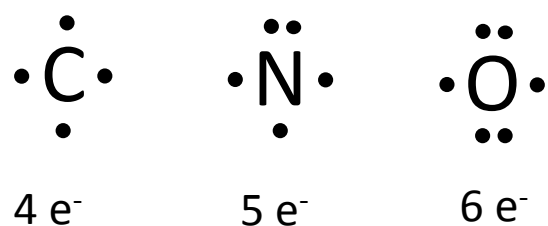
2.3 Cargas formales y pares solitarios



La representación de líneas también nos permite identificar de forma sencillas los pares libres

Hay que ser capaz de reconocer las cargas y pares solitarios que tiene cada átomo en la molécula

En la representación esquemática, cualquier **átomo** se encuentra **cargado** hay que **señalarlo**, sin embargo los **pares de electrones solitarios** no hay que **señalarlos**



Carga formal

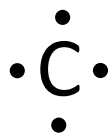
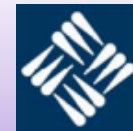
Si el Carbono tiene: 3 e⁻ (+) 5 e⁻ (-)

Si el Nitrógeno tiene: 4 e⁻ (+) 6 e⁻ (-)

Si el Oxígeno tiene: 5 e⁻ (+) 7 e⁻ (-)

Sólo pueden formar hasta 4 enlaces

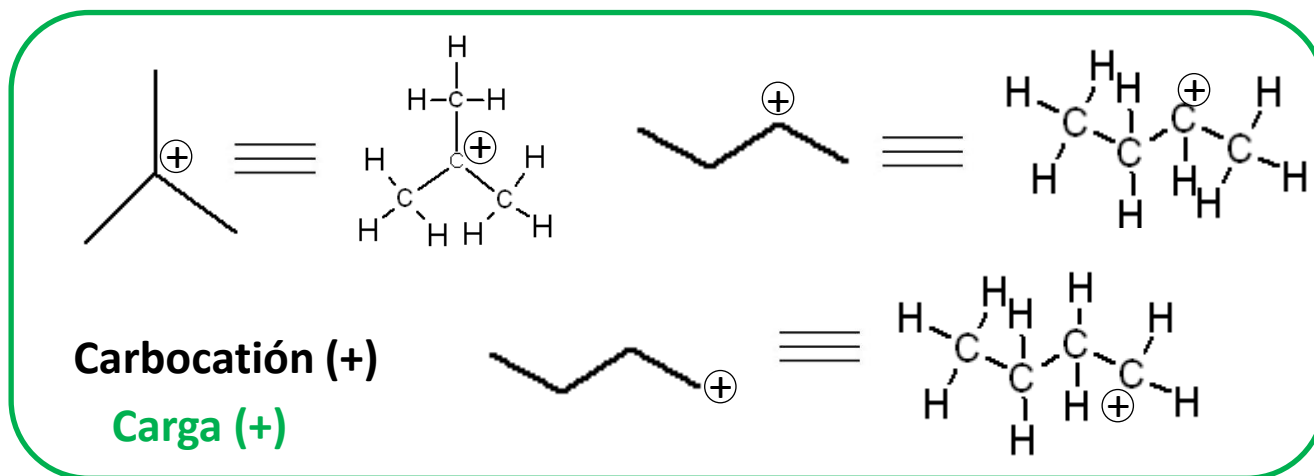
2.3 Cargas formales y pares solitarios



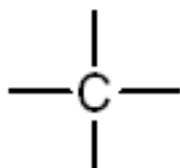
4 e⁻

El carbono podrá estar cargado de forma positiva o negativa

Sólo tendrá pares solitarios en caso de encontrarse cargado negativamente nunca en su estado fundamental

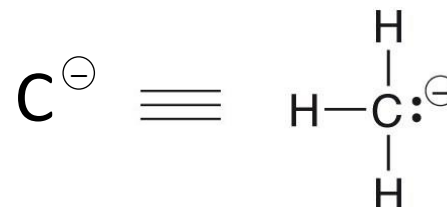


Neutro

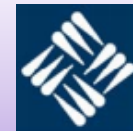


Carboanión (-)

Carga (-)



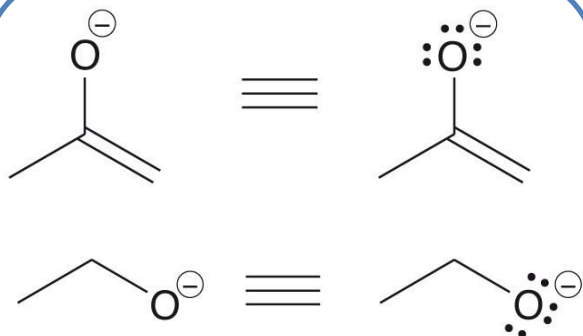
2.3 Cargas formales y pares solitarios



El Oxígeno se podrá encontrar de 3 formas diferentes

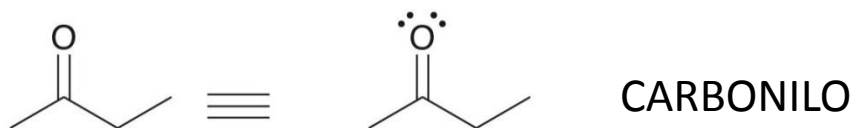
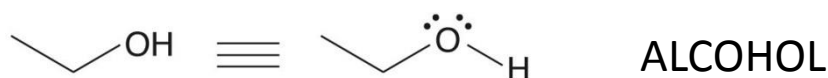


1 enlace + 3 pares de e^-



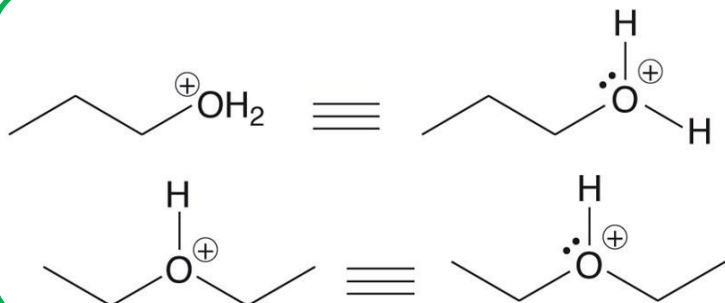
Carga (-)

2 enlace + 2 pares de e^-



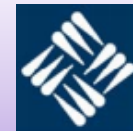
Neutro

3 enlace + 1 pares de e^-

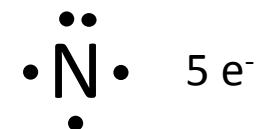


Carga (+)

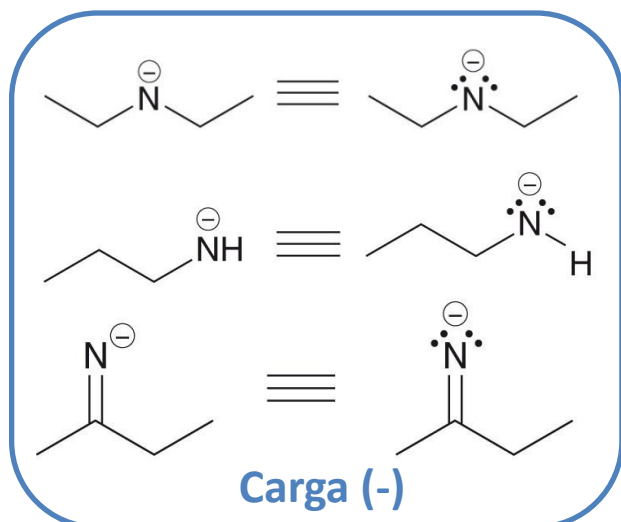
2.3 Cargas formales y pares solitarios



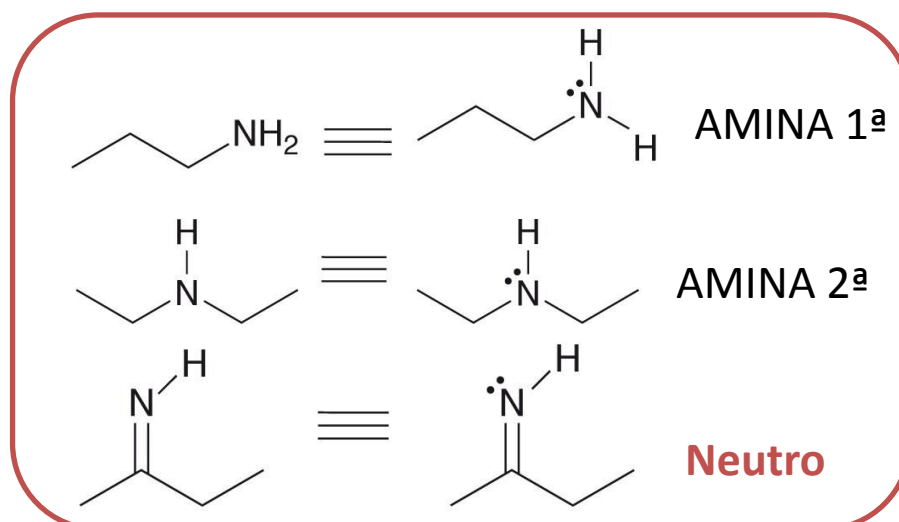
El Nitrógeno se podrá encontrar de 3 formas diferentes



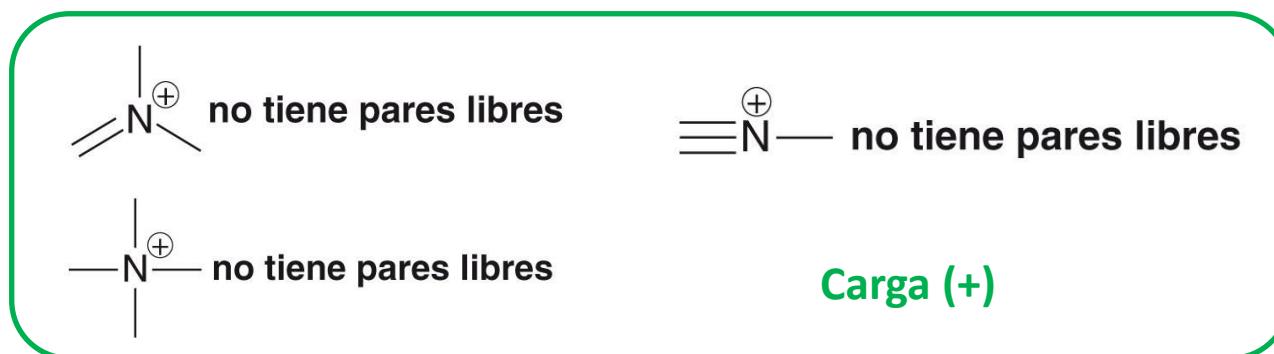
2 enlace + 2 pares de e^-



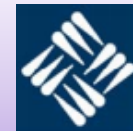
3 enlace + 1 pares de e^-



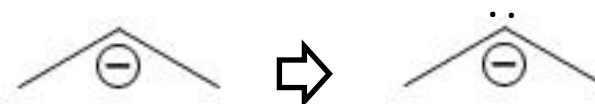
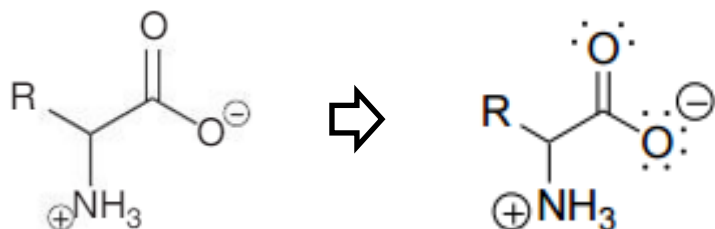
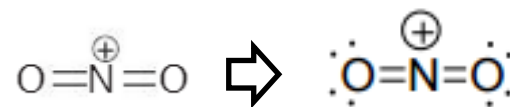
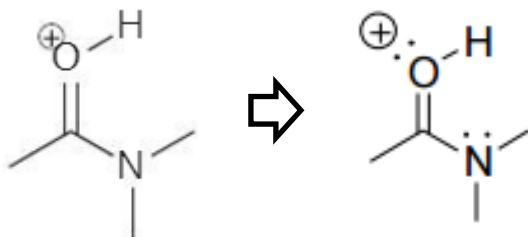
4 enlace sin pares de electrones libres



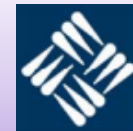
2.3 Cargas formales y pares solitarios



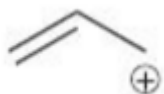
Hay que saber reconocer identificar los pares libres de electrones



2.4 Reconocimiento de formas resonantes



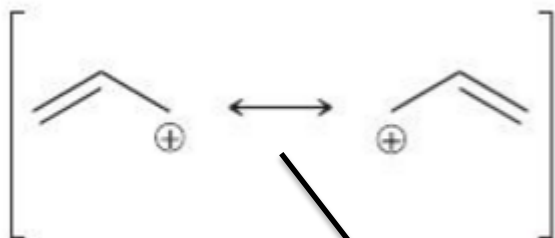
Existen moléculas donde los enlaces no están 'localizados', los electrones no se encuentran ubicados en una única región. Los electrones se mueven entre distintas posiciones.



Carbocatión alílico

Carbono alílico = un carbono en posición contigua a un doble enlace

2 formas resonantes para la misma estructura

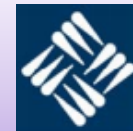


Representación real del carbocatión alílico: existen 2 formas resonantes que nos permiten describir este carbocatión.

Flecha de doble cabeza: indica que ambas estructura son formas resonantes de la misma estructura

Corchetes: indican que nos encontramos ante formas resonante

2.4 Reconocimiento de formas resonantes



Flechas curva: nos van a permitir representar el movimiento de electrones



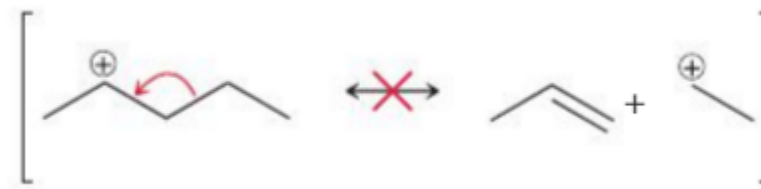
Cola: nos indica donde de donde provienen los electrones

Cabeza: hacia donde se mueven los electrones

Los electrones de las moléculas van a fluir desde posiciones donde la molécula es menos estables hasta posiciones donde la molécula sea más estable

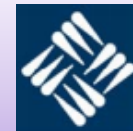
Podremos mover electrones siempre que **no** rompamos una de las 2 siguientes reglas:

1. No romper enlaces simples (cola mal ubicada)



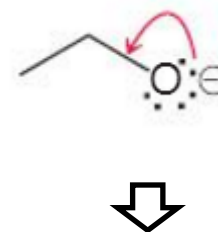
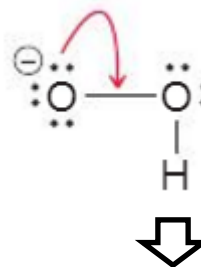
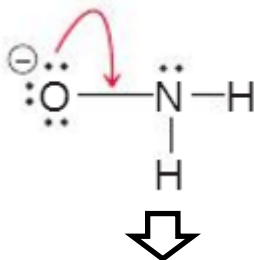
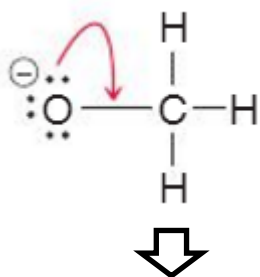
Los electrones que forman enlace simple no se van a ver suficientemente atraídos como para romper la molécula

2.4 Reconocimiento de formas resonantes



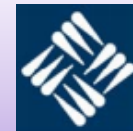
2. No exceder el octeto para los elementos del segundo periodo (cabeza mal ubicada)

Estos átomos no pueden acoger a más de 8 electrones

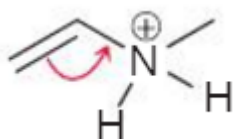


Estas flechas violan la segunda regla

2.4 Reconocimiento de formas resonantes



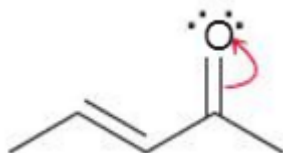
¿Son válidas las formas resonantes que se muestran?



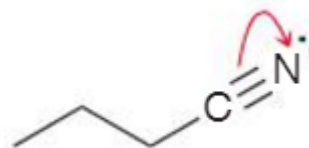
Viola 2ª regla



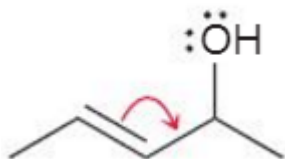
Viola 1ª regla



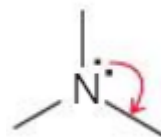
Válida



Válida



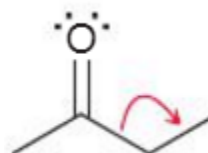
Viola 2ª regla



Viola 2ª regla



Viola 2ª regla



Viola 1ª regla

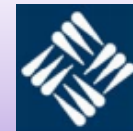


Viola la 2ª regla

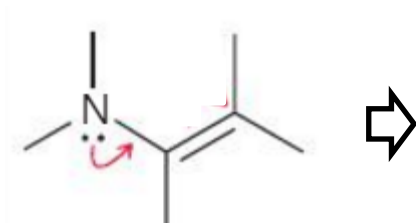


Viola 2ª regla

2.4 Reconocimiento de formas resonantes

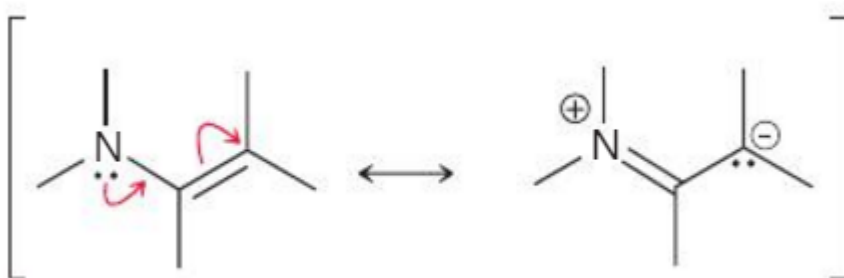


La mayoría de las veces utilizaremos más de una flecha curva



Nos da lugar a una estructura que viola la 2ª regla

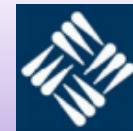
Si utilizamos 2 flechas curvas:



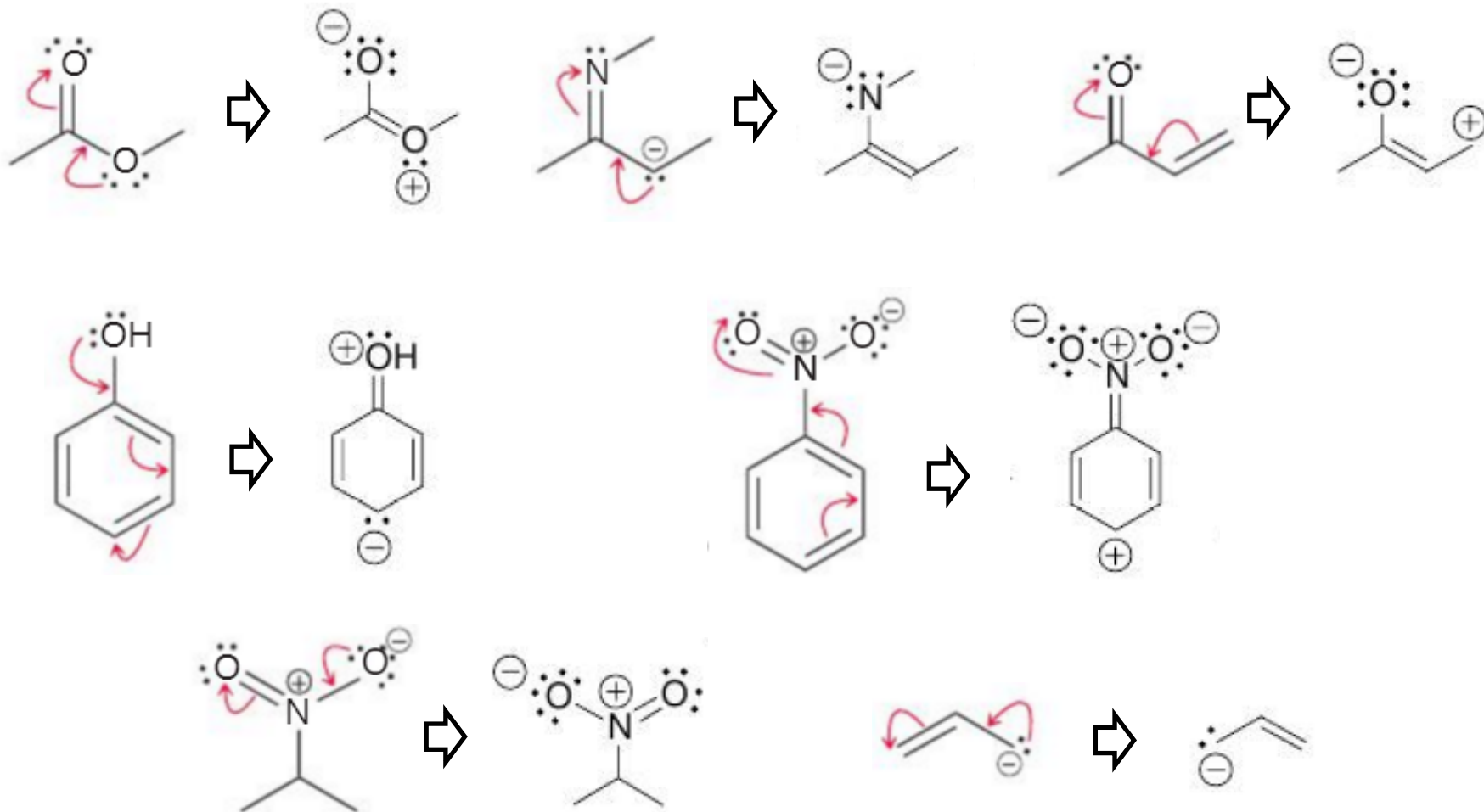
La segunda estructura ya no viola ninguna regla, y por tanto serán dos formas resonantes perfectamente válidas

Cuando hay más de una flecha curva, tenemos que analizar la estructura final tras los sucesivos movimientos de electrones.

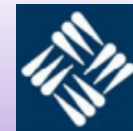
2.4 Reconocimiento de formas resonantes



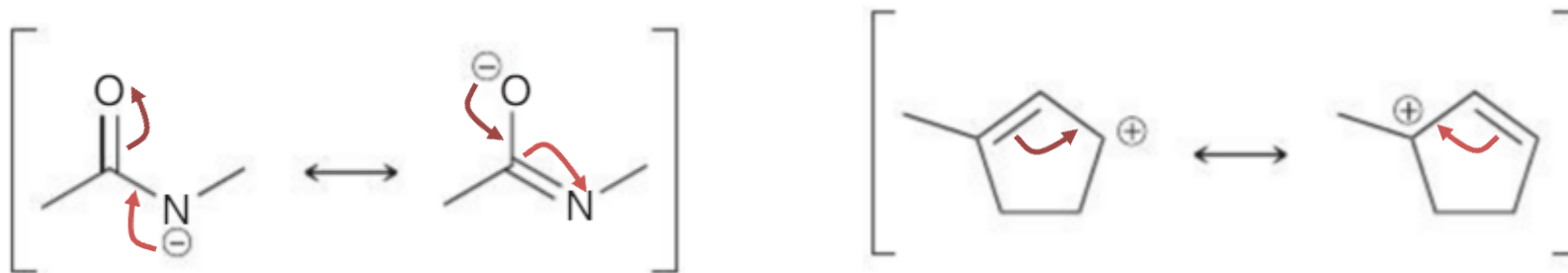
Señala la forma resonante que se muestra con sus cargas asociadas



2.4 Reconocimiento de formas resonantes

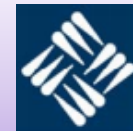


Señala las flechas curvas necesarias para convertir las estructuras de resonancia



Donde aparece carga (-) han llegado electrones.
Donde aparece carga (+) han salido electrones

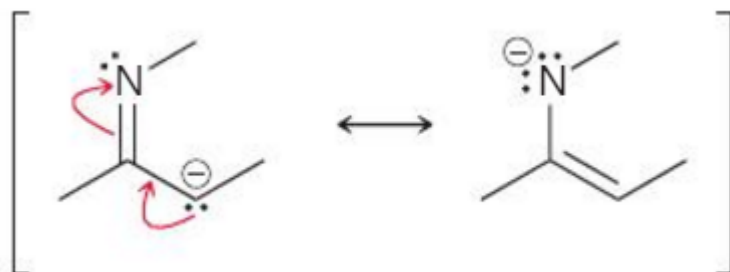
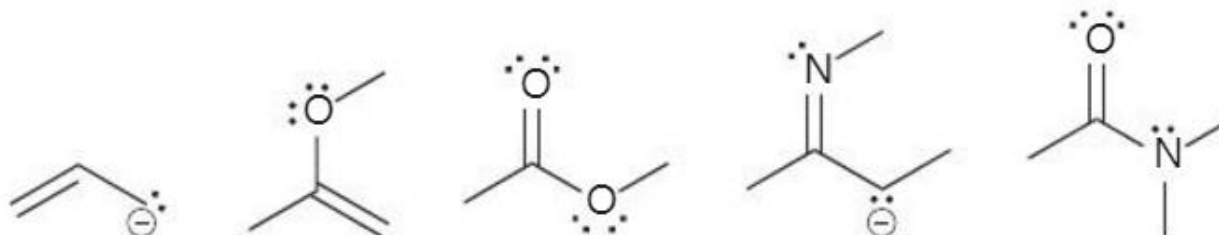
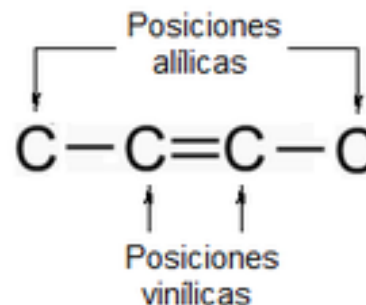
2.4 Reconocimiento de formas resonantes



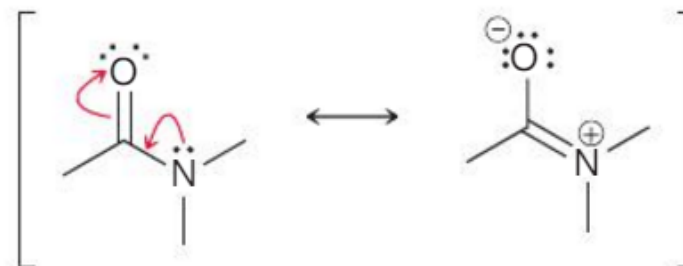
Existen 5 patrones que se repiten para reconocer estructuras resonantes

1. Un par de electrones libre alílico.

Con una doble fecha podremos mover los electrones libres en posición alílicas

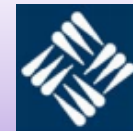


Con carga (-) esta se traslada

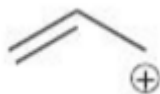


Sin carga, el átomo con par libre se queda (+), el átomo que recibe el par se queda (-)

2.4 Reconocimiento de formas resonantes

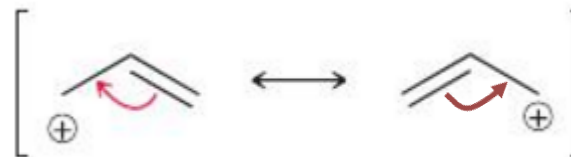


2. Carga positiva alílica.

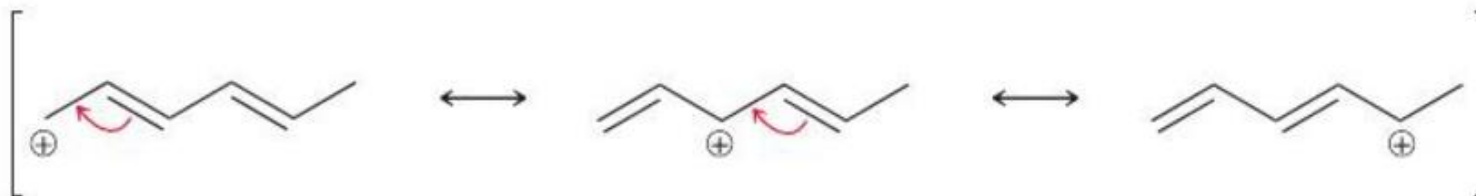


Carbocatión alílico

Con una sola flecha desplazamos los electrones y la carga

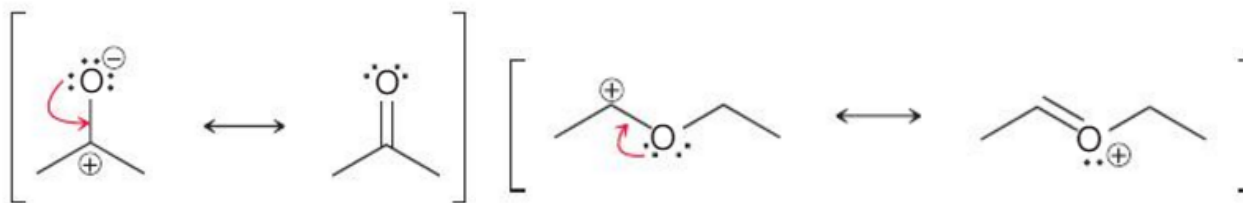
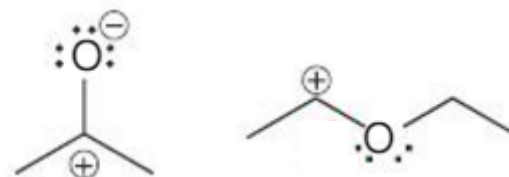


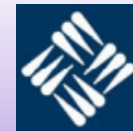
Cuando hay varios dobles enlaces 'conjugados' el desplazamiento se transfiere



3. Un par libre adyacente a una carga positiva

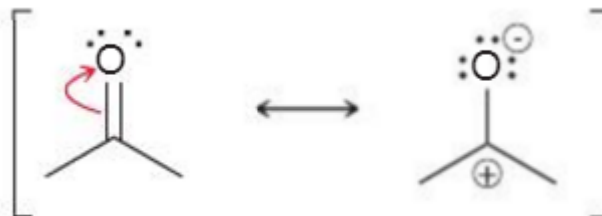
Con una sola flecha desplazamos los electrones y la carga





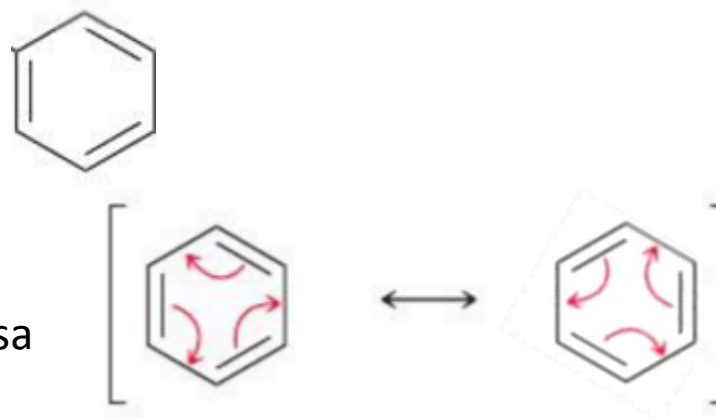
4. Un enlace π entre dos átomos de diferente electronegatividad

Con una flecha desplazamos los electrones hacia el átomo de más electronegatividad, generando dos cargas, (+) en el átomo menos EN, y (-) en el átomo más EN

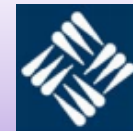


5. Enlaces π conjugados en un anillo

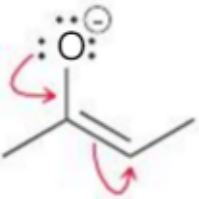
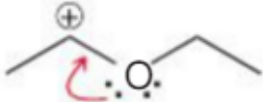
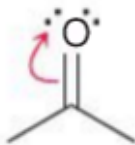
Los dobles enlaces pasan a ocupar las posiciones de los enlaces simples y viceversa



2.4 Reconocimiento de formas resonantes

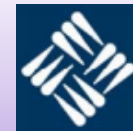


Resumen de los 5 patrones para la formación de estructuras resonantes

Par libre alílico  Dos flechas curvas	Carga positiva alílica  Una flecha curva	Par libre adyacente a una carga positiva  Una flecha curva	Enlace π entre dos elementos de diferente electronegatividad  Una flecha curva	Enlaces π conjugados formando un anillo  Tres flechas curvas
--	---	--	--	--

En ocasiones el número de estructuras resonantes puede ser muy superior a 2, tendremos que ser capaces de predecir y dibujar todas las posibles formas resonantes de un compuesto, ya que todas las formas resonantes que existan de un compuesto son estructuras que **son factibles de ser reactivas**.

2.5 Formulación y nomenclatura



Existe una normativa estricta en la nomenclatura de los compuestos orgánicos, la IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) publica las normas para que todas las moléculas tengan un nombre sistemático.

Muchas moléculas se nombran mediante nombres más sencillos nombre tradicional

Todo compuesto ya sea más o menos complejo tiene una estructura similar

Prefijo-Cadena principal-Sufijo

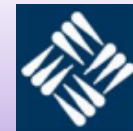
Prefijo: nos indica los 'sustituyentes' que están anclados a la cadena principal

Cadena principal: Se trata de la cadena más larga de átomos de carbono que además incluye al G.F. de mayor prioridad

Sufijo: Indica el G.F. prioritario, por tanto el grupo funcional al que pertenece la molécula

Si no hay sustituyentes, no existe prefijo

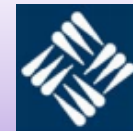
2.5 Formulación y nomenclatura



Asignaremos nombre a la cadena principal en función del tamaño (n) de esta

n	Raíz + sufijo	n	Raíz + sufijo	n	Raíz + sufijo
1	Metano	16	Hexadecano	31	Hentriacontano
2	Etano	17	Heptadecano	32	Dotriacontano
3	Propano	18	Octadecano	33	Tritriacontano
4	Butano	19	Nonadecano	34	Tretratriacontano
5	Pentano	20	Eicosano	35	Pentatriacontano
6	Hexano	21	Heneicosano	36	Hexatriacontano
7	Heptano	22	Docosano	37	Heptatriacontano
8	Octano	23	Tricosano	40	Tetracontano
9	Nonano	24	Tetracosano	50	Pentacontano
10	Decano	25	Pentacosano	60	Hexacontano
11	Undecano	26	Hexacosano	70	Heptacontano
12	Dodecano	27	Heptacosano	80	Octacontano
13	Tridecano	28	Octacosano	90	Nonacontano
14	Tetradecano	29	Nonacosano	100	Hectano
15	Pentadecano	30	triacontano	132	Dotriacontahectano

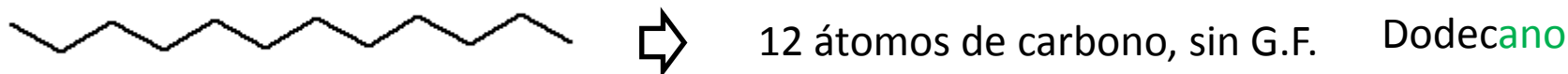
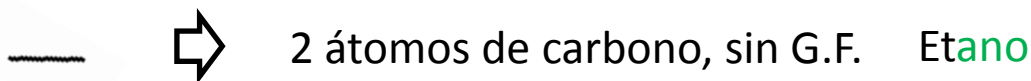
2.5 Formulación y nomenclatura



Moléculas sin sustituyentes y sin G.F.

Sufijo: -ano

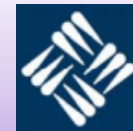
1	Metano
2	Etano
3	Propano
4	Butano
5	Pentano
6	Hexano
7	Heptano
8	Octano



Si hay cadenas cerradas, ciclos, hay que usar la palabra ciclo como prefijo



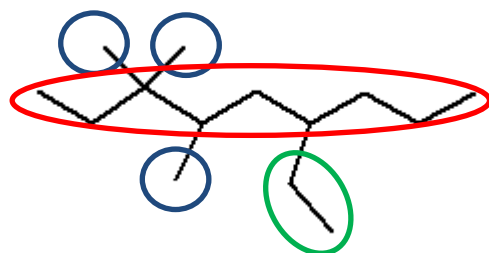
2.5 Formulación y nomenclatura



Moléculas con sustituyentes (cadenas ramificadas)

Cuando hay más de una cadena, hay que identificar la cadena principal, el resto de cadenas se tratan como cadenas sustituyentes

Cuando un alcano actúa como sustituyente su sufijo es: (-il)



- Cadena principal (nonano)
- Sustituyente metano (metil)
- Sustituyente etano (etil)

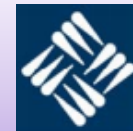
6-etil-3,3,4-trimetil-nonano

La cadena se enumera de tal forma que algún sustituyente tenga el menor número posible

Los sustituyentes se escriben por orden alfabético

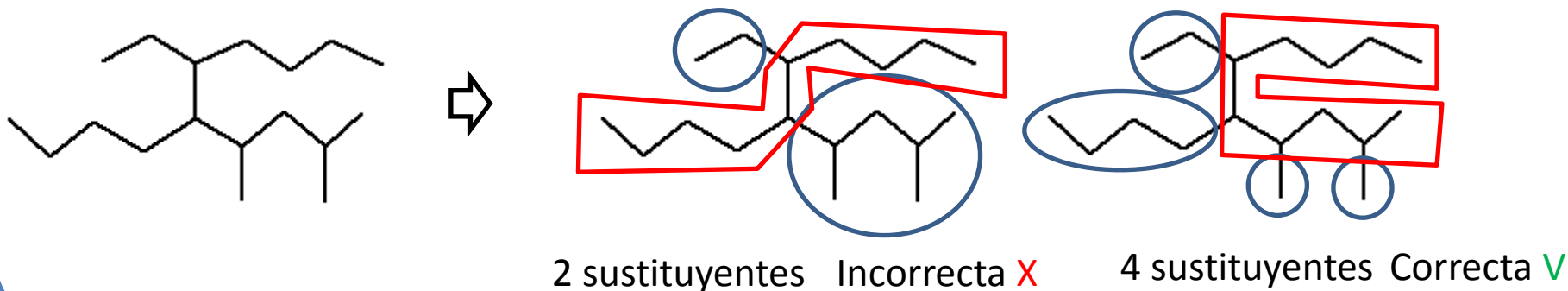
Si hay más de un sustituyente igual se utiliza el sufijo -di, -tri, -tetra etc etc, este sufijo no se tiene en cuenta para el orden alfabético

2.5 Formulación y nomenclatura

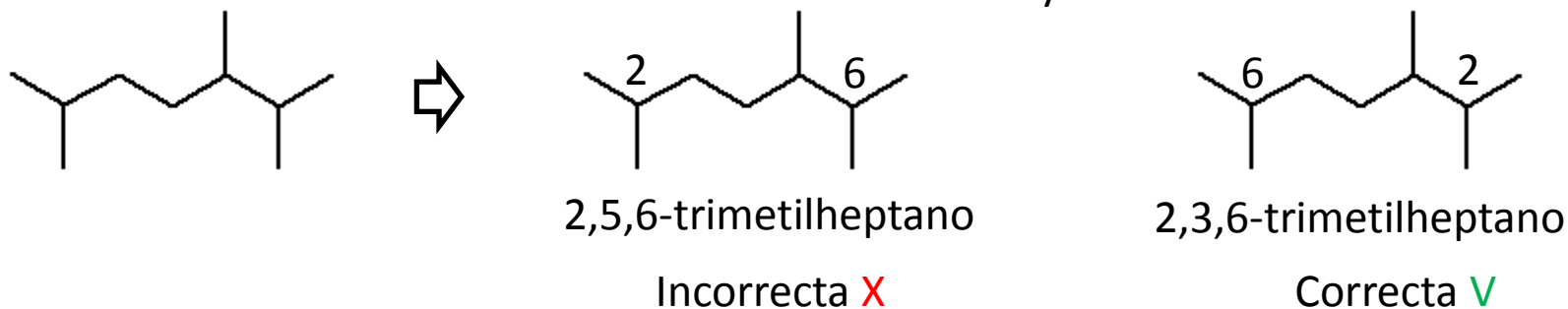


Moléculas con sustituyentes (cadenas ramificadas)

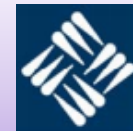
Si podemos elegir 2 cadenas principales del mismo tamaño, seleccionaremos aquella que tenga más sustituyentes



Si dos sustituyentes ocupan la primera posición, asignamos la numeración en función del segundo sustituyente

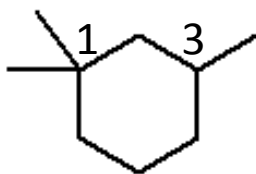
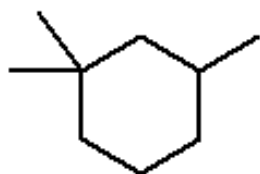


2.5 Formulación y nomenclatura



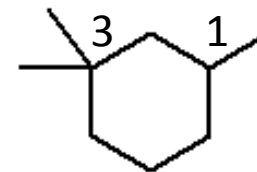
Moléculas con sustituyentes (cadenas ramificadas)

Para elegir la numeración de la cadena un carbono con más sustituyentes tiene preferencia sobre un carbono con menos sustituyentes



1,1,3-trimetil ciclohexano

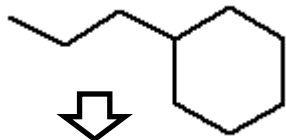
Correcta ✓



1,3,3-trimetil ciclohexano

Incorrecta ✗

Cuando hay un ciclo y una cadena, el más corto de los dos actuará de sustituyente

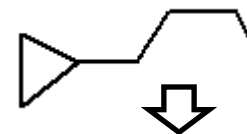


Propil ciclohexano

Correcta ✓

1-Ciclohexil propano

Incorrecta ✗



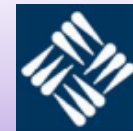
Butil ciclopropano

Incorrecta ✗

1-ciclopropil butano

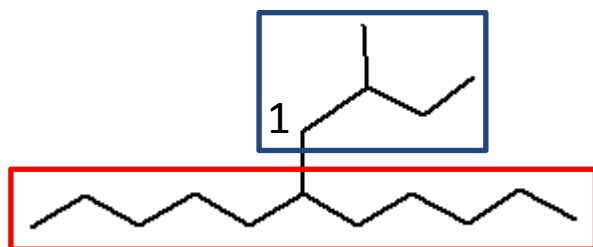
Correcta ✓

2.5 Formulación y nomenclatura



Moléculas con sustituyentes (cadenas ramificadas)

Cuando los sustituyentes también se ramifican, hay que tratarlos como un sustituyente dentro de otro sustituyente

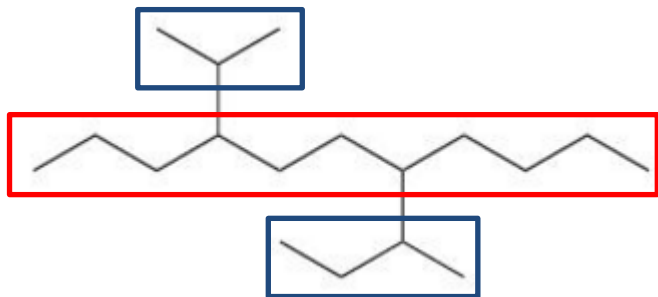


1 sustituyente ramificado → 2-metil butilo
undecano

6-(2-metil butil) undecano

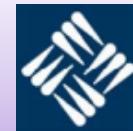
Para numerar los sustituyentes, siempre empezaremos a nombrar desde la cadena principal

Seguimos todas las reglas vistas hasta ahora



4-(1-metil etil)-7-(1-metil-propil) undecano

2.5 Formulación y nomenclatura



Moléculas con sustituyentes (cadenas ramificadas)

Hay sustituyentes ramificados muy utilizados con nombres tradicionales

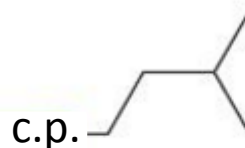
Cadena principal



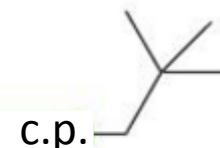
Isopropilo
(1-metiletilo)

3 C

5 C

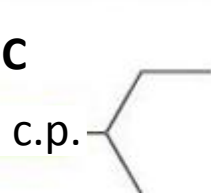


Isopentilo o isoamilo
(3-metilbutilo)

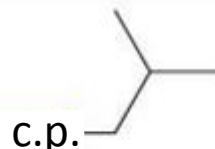


Neopentilo
(2,2-dimetilpropil)

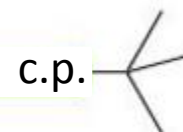
4 C



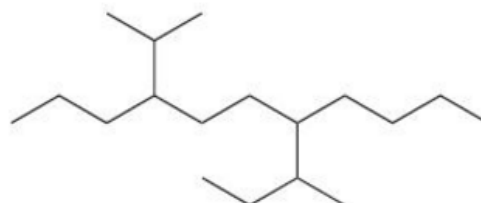
sec-butilo
(1-metilpropilo)



Isobutilo
(2-metilpropilo)

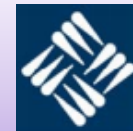


terc-butilo
(1,1-dimetiletilo)



4-isopropil-7-sec-butil undecano

4-(1-metil etil)-7-(1-metil-propil) undecano

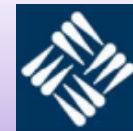


Moléculas con sustituyentes (cadenas ramificadas)

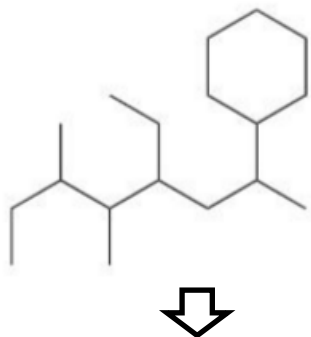
1. Identificar la cadena principal (cadena parental)
2. Identificar y nombrar los sustituyentes
3. Numerar la cadena principal y cadenas secundarias, asignar un número (localizador) a cada sustituyente
4. Ordenar los sustituyentes de forma alfabética

Con estos pasos y práctica llegamos a nombrar la gran mayoría de los compuestos sin grupos funcionales

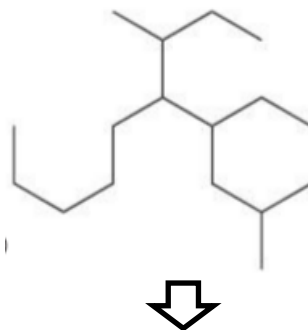
2.5 Formulación y nomenclatura



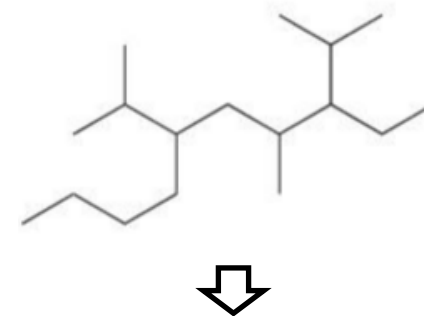
Moléculas con sustituyentes (cadenas ramificadas)



2-ciclohexil-4-etil-5,6-dimetiloctano

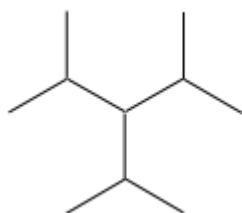


5-*sec*-butil-4-etil-2-metildecano



3-etil-6-isopropil-2,4-dimetildecano

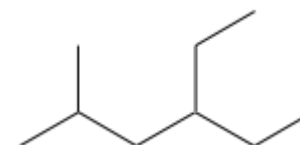
3-isopropil-2,4-dimetilpentano



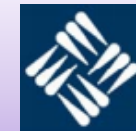
1,1,2,2-tetrametilciclopropano



4-etil-2-metilhexano



2.5 Formulaci3n y nomenclatura



PRINCIPALES GRUPOS FUNCIONALES EN ORDEN DE PRIORIDAD			
Cuando un compuesto tiene dos o m1s grupos funcionales, su nombre base tendr1 la terminaci3n del grupo con mayor prioridad y el otro grupo ser1 un sustituyente.			
Grupo funcional	F3rmula	Sufijo	Cuando el grupo es un sustituyente se nombra como:
11cidos carboxilicos	$\text{R}-\text{C}(=\text{O})\text{OH}$	-ico	carboxi-
Anhidridos de 11cido	$\text{R}-\text{C}(=\text{O})\text{O}-\text{C}(=\text{O})\text{R}$	-ico	
Esteres	$\text{R}-\text{C}(=\text{O})\text{O}-\text{R}$	-ato de alquilo	alcoxi-carbonil-
Halogenuros de 11cido	$\text{R}-\text{C}(=\text{O})\text{X}$	halogenuro de -ilo	halogeno-alcanoil-
Amidas	$\text{R}-\text{C}(=\text{O})\text{NH}_2$	-amida	carbamoil-
Nitrilos	$\text{R}-\text{C}\equiv\text{N}$	-nitrilo	ciano-
Aldehidos	$\text{R}-\text{C}(=\text{O})\text{H}$	-al	formil- (carbaldehido)
Cetonas	$\text{R}-\text{C}(=\text{O})\text{R}$	-ona	oxo-
Alcoholes	$\text{R}-\text{OH}$	-ol	hidroxi-
Mercaptanos	$\text{R}-\text{SH}$	-tiol	mercapto-
Aminas	$\text{R}-\text{NH}_2$	-amina	amino-
Eteres	$\text{R}-\text{O}-\text{R}$	11ter	alcoxi-
Sulfuros	$\text{R}-\text{S}-\text{R}$	sulfuro	alquiltio-
Alquenos	$\text{R}-\text{CH}=\text{CH}-\text{R}$	-eno	alquenil-
Alquinos	$\text{R}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{R}$	-ino	alquinil-
Halogenuros	$\text{R}-\text{X}$	-	hal3geno-
Nitro	$\text{R}-\text{NO}_2$	-	nitro-
Alcanos	$\text{R}-\text{H}$	-ano	alquil-
Para nombrar a los 11cidos carboxilicos y a los anhidridos es necesario anteponer la palabra 11cido y anhidrido respectivamente, seguido del nombre de la cadena hidrocarbonada con el sufijo -ico.			

Mayor prioridad

En la mol3cula tendremos siempre que encontrar el grupo funcional de mayor importancia

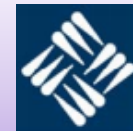


Sufijo

Si hay m1s grupos funcionales estos se tratan como sustituyentes, con su nombre de sustituyente

Menor prioridad

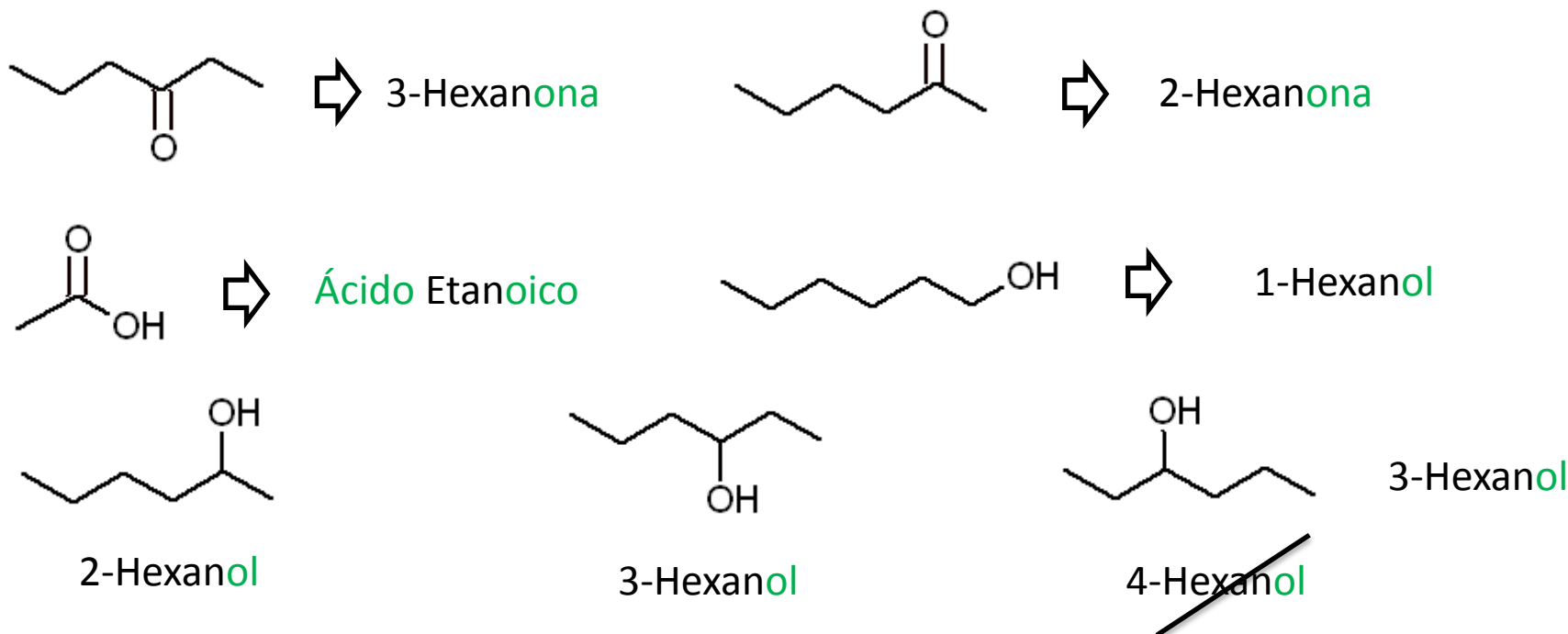
2.5 Formulación y nomenclatura



Moléculas con 1 G.F.

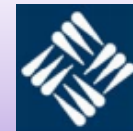
Simplemente hay que cambiar el sufijo por el que corresponde al G.F.

Si es necesario indicar la posición del G.F. se indica mediante un número que introducimos antes de la cadena principal



La cadena siempre se empieza a contar desde el extremo más cercano al G.F.

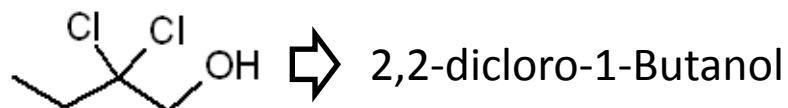
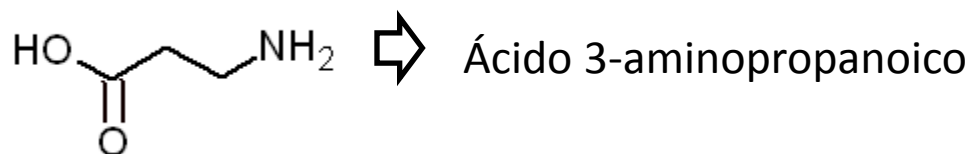
2.5 Formulación y nomenclatura



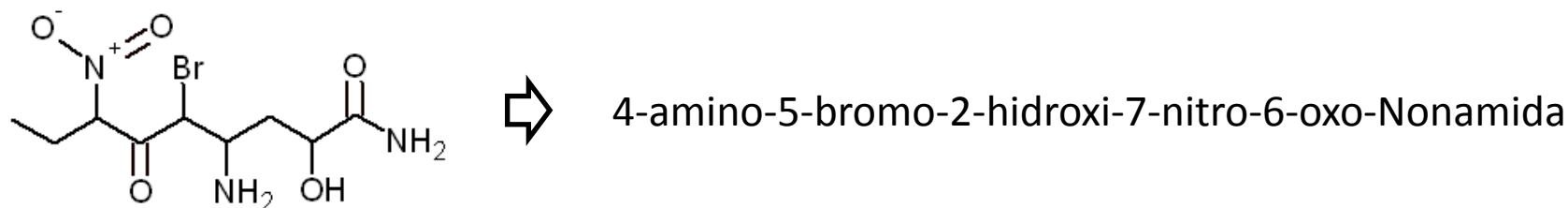
Moléculas con + de 1 G.F.

Todos los G.F. no prioritarios se nombran con su nombre de sustituyente

Se indica la posición de los sustituyentes con un número antes del nombre

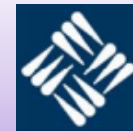


Cuando hay dos sustituyentes en el mismo carbono numeramos dos veces y usamos el prefijo (di)



La cadena siempre se empieza a contar desde el extremo más cercano al G.F. principal

2.5 Formulación y nomenclatura



Nitrobenceno

2-metil-butanoato de 2-cloro-propilo

1-butanol

1,3-butadieno

2-ciclohexenol

Cloruro de propilo

Acetonitrilo

Benzaldehído

3-hexanol

4,4-dibromo-2-metil-heptano

Propanoato de etilo

Metilpropileter

2,4-heptanodiol

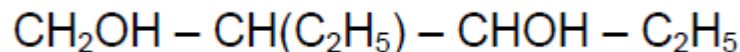
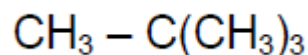
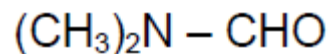
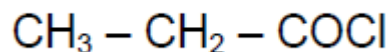
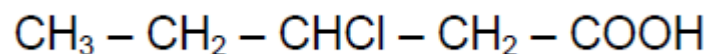
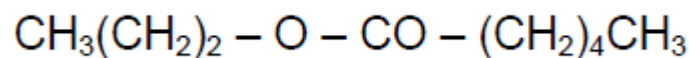
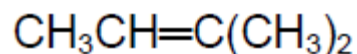
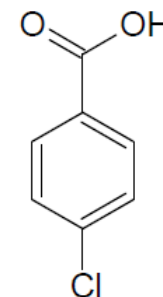
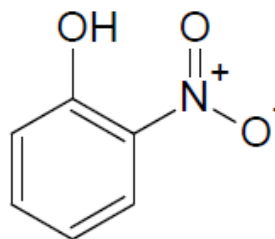
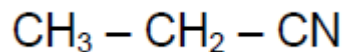
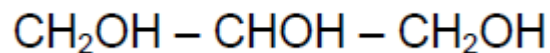
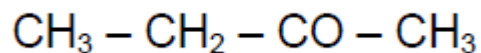
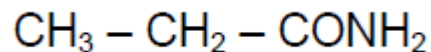
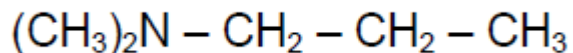
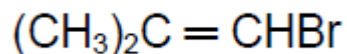
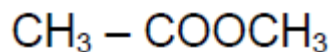
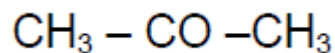
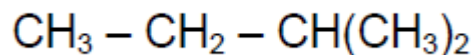
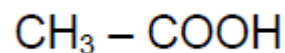
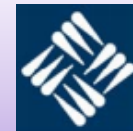
Fenol

Metilpropilamina

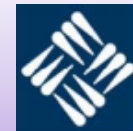
Metanol

1,2-dinitrobenceno

2.5 Formulación y nomenclatura



2.6 Tipos de Isomería



Los isómeros son moléculas que tienen la misma fórmula molecular pero diferente estructura

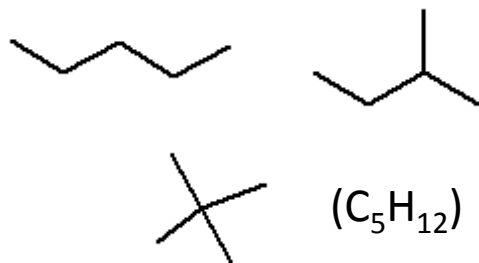
2 Familias de Isomerías principales:

1) **Isómeros Estructurales**: Son moléculas que pese a tener la misma fórmula molecular tienen una **diferente distribución de enlaces**

Isómeros Estructurales

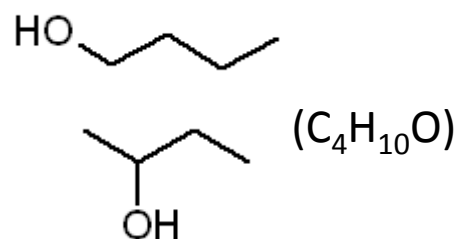
De cadena o esqueleto

Las cadenas carbonadas tienen diferentes esqueleto



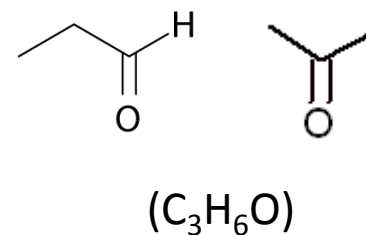
De posición

El mismo G.F. se encuentra unido en diferentes posiciones

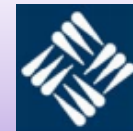


De función o G.F.

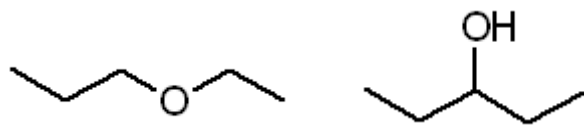
Las moléculas tienen diferentes G.F.



2.6 Tipos de Isomería



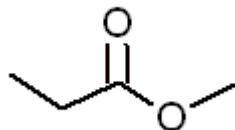
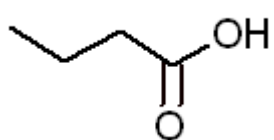
Identifica si cada par de compuestos son isómeros, ¿que tipo de isomería presentan?



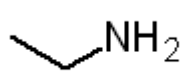
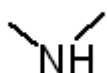
Isómeros de grupo (alcohol – éter)



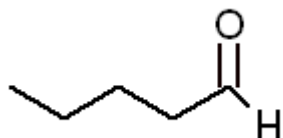
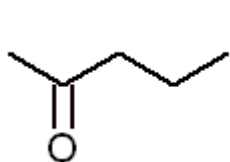
No son isómeros



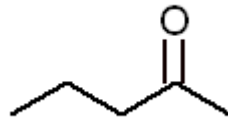
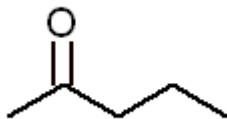
Isómeros de grupo (ácido– ester)



Isómeros de posición

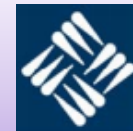


Isómeros de grupo (cetona– aldehido)



No son isómeros, son el mismo compuesto

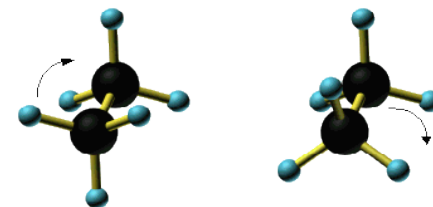
2.6 Tipos de Isomería



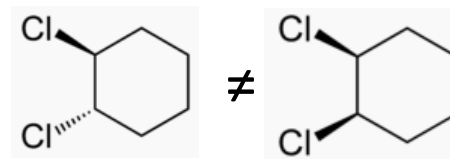
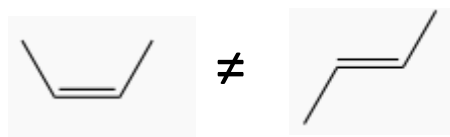
2) **Esteroisómeros (Isómeros espaciales)**: Son moléculas que pese a tener la misma forma molecular tienen y la misma distribución de enlaces, sin embargo **su disposición en el espacio es distinta**

Es mucho más importante, porque a priori puede parecer que dos isómeros son lo mismo, por tanto tendremos que aprender a identificarlos y nombrarlos

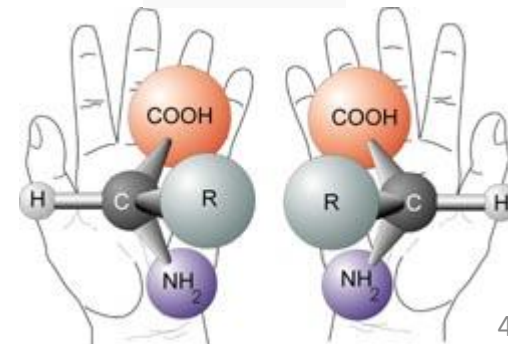
Isómeros conformacionales: Se deben al giro libre del enlace simple



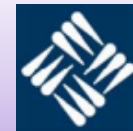
Isómeros geométricos o cis-trans: Se deben a la restricción del giro libre en dobles enlaces o en estructuras cíclicas



Isomería óptica o enantiomería: Moléculas no superponibles



2.7 Reactividad química y mecanismos



Tenemos una reacción química cuando a partir de unos reactivos obtenemos unos productos

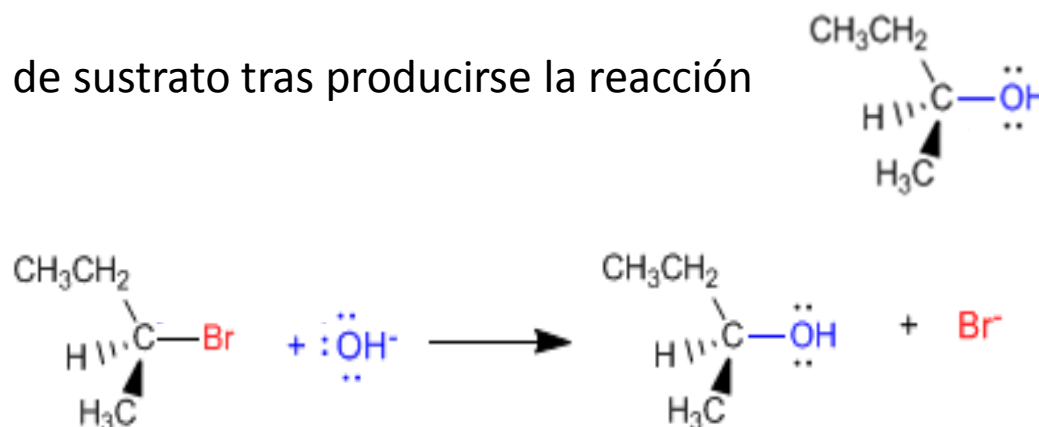
Para identificar cada uno de los sujetos definimos:

Sustrato: molécula que será atacada y sufrirá algún tipo de modificación

Reactivo o grupo entrante: átomo o molécula que ataca al sustrato $\text{:}\ddot{\text{O}}\text{H}^-$

grupo saliente: átomo o molécula que es expulsado del sustrato Br^-

Producto: molécula de sustrato tras producirse la reacción



2.7 Reactividad química y mecanismos

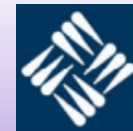


Diagrama de Energía genérico para una reacción exotérmica con una E_a determinada en una sola etapa

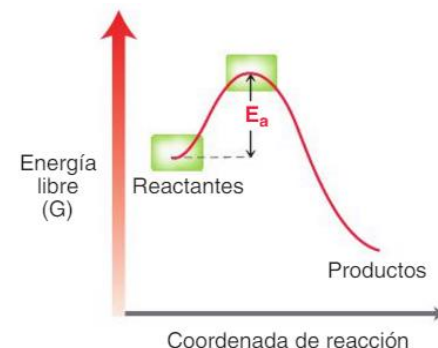
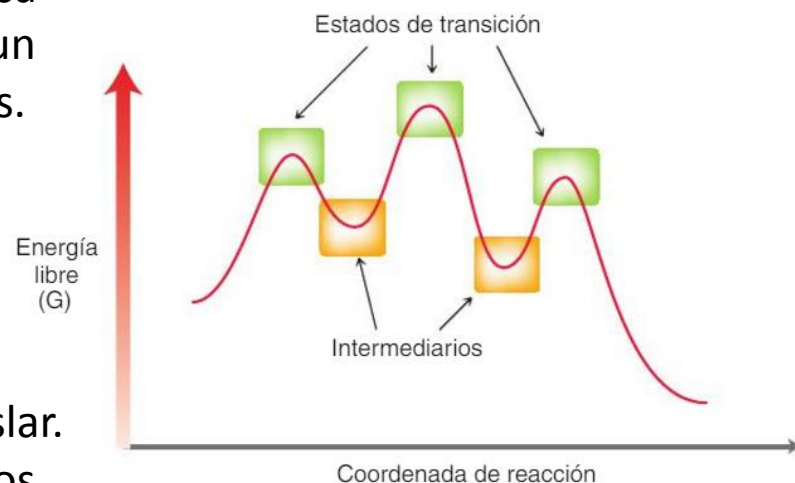


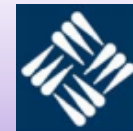
Diagrama de Energía para una reacción en varias etapas

Estados de transición: Es un estado por el que atraviesa la reacción, pero es inestable y no se puede aislar. Es un estado donde se están formando o rompiendo enlaces. O ambas cosas de forma simultánea

Intermediario: Es un estado de menor energía que los estados de transición que se puede aislar. Es una molécula intermedia entre reactivos y productos. Muchas veces se tratará de una molécula cargada.

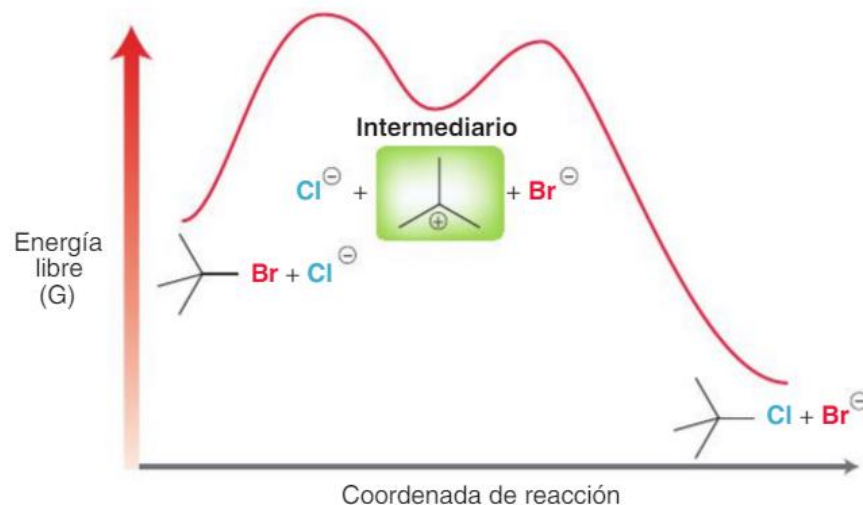
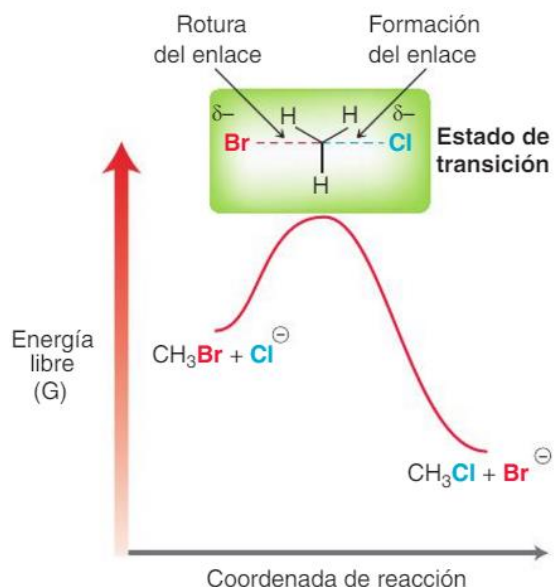


2.7 Reactividad química y mecanismos



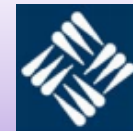
Conocer los estados de activación y sobretodo los intermediarios (ya que se pueden aislar) nos va a permitir entender el camino que toma la reacción. (mecanismo)

Todas las reacciones tienen por lo menos un estado de transición, pero no todas las reacciones tienen intermediarios



Comparación de una sustitución de bromo por cloro, sin intermediario (una única etapa), y con intermediario (2 etapas)

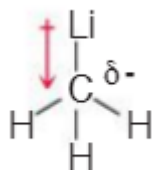
2.7 Reactividad química y mecanismos



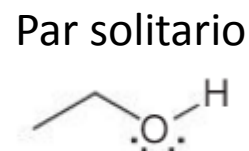
La gran mayoría de reacciones que vamos a ver se deben a interacciones de tipo iónico, por diferencia de electronegatividad entre los átomos implicados.

Para identificar centros reactivos de la molécula, zonas con predisposición a atacar o ser atacadas por otras molécula, definimos dos tipos de centros de interacción.

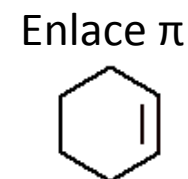
Nucleófilo (Nu⁻): Átomo con gran cantidad de electrones que será capaz de donar un par de electrones. Grupo Dador de electrones. Buscará reaccionar con zonas de baja densidad electrónica.



Efecto inductivo
(I⁻)

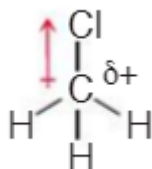


Par solitario

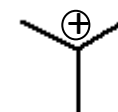


Enlace π

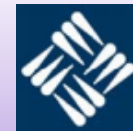
Electófilo (E⁺): Átomo deficiente en electrones capaz de aceptar un par de electrones libres. Grupo aceptor de electrones. Buscará reaccionar con zonas de alta densidad de electrónica.



Efecto inductivo
(I⁺)



Orbital p vacío



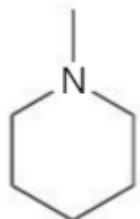
Señala todos los centro Nu^- y E^+ de las moléculas indicando el motivo del efecto



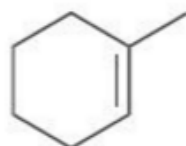
Inducción: 1 centro Nu^- y un centro E^+



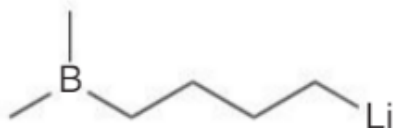
Inducción + 2 pares de electrones: 2 centro Nu^- y un centro E^+



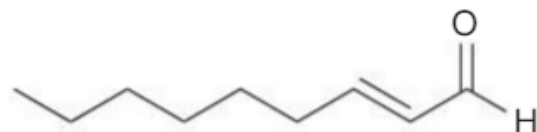
1 par de electrones: 1 centro Nu^-



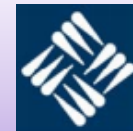
Enlace π : 1 centro Nu^-



4 Inducciones: 4 centro Nu^- y 2 centro E^+



Inducción + enlace π + par de electrones + orbital p vacío:
3 centro Nu^- y 2 centro E^+



Existen sólo 4 patrones de desplazamiento de electrones todos los mecanismos iónicos se convierten en combinación de estos 4 patrones

1. Ataque nucleófilo

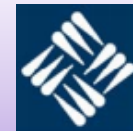
Se trata de un nucleófilo atacando a un electrófilo formando un enlace (Nu-E)



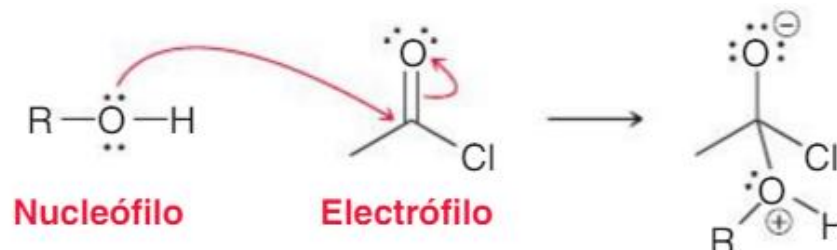
Si hay 2 cargas contrarias se anulan

El resultado es una reacción de **adición**, puesto que el producto es la suma del sustrato mas el reactivo

2.7 Reactividad química y mecanismos

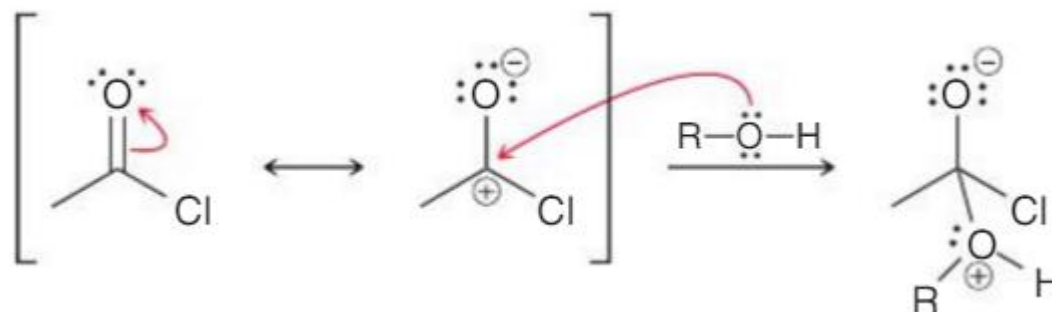


En muchas ocasiones el ataque nucleófilo se continúa con un nuevo movimiento de flechas



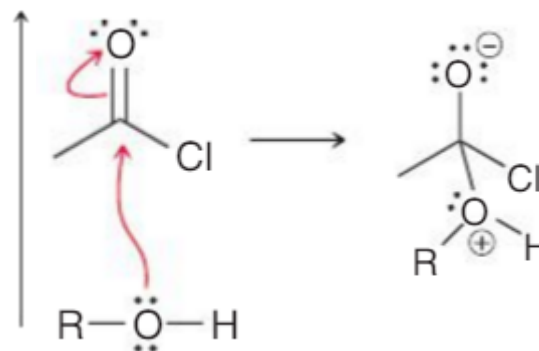
Este segundo movimiento de electrones se puede entender de dos maneras:

1. Por formas resonantes:

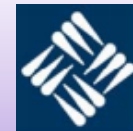


2. Por desplazamiento de la densidad electrónica:

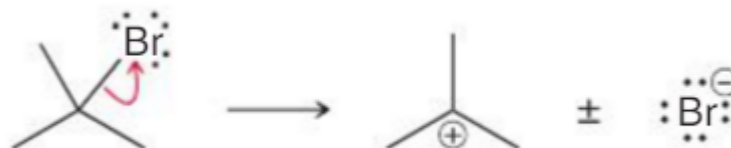
El par de electrones libre que ataca empuja a los electrones del doble enlace hasta el oxígeno



Aunque haya 2 flechas se considera un único ataque Nucleófilo

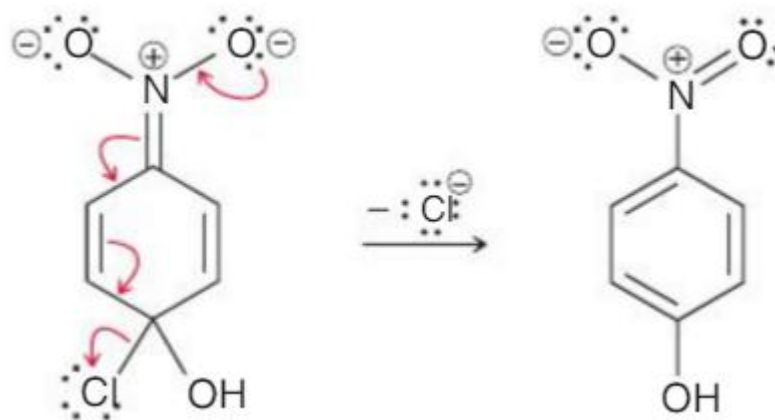


2. Pérdida del grupo saliente



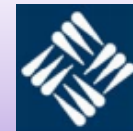
El grupo saliente se lleva el par de electrones del enlace, dejando una carga positiva

En este caso también hay posibilidad de que la pérdida de un grupo saliente vaya acompañada de varias flechas curvas



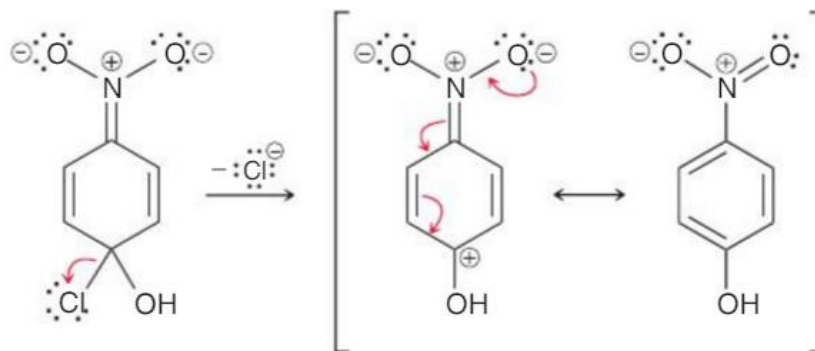
Se trata de un único proceso de pérdida del grupo saliente

2.7 Reactividad química y mecanismos

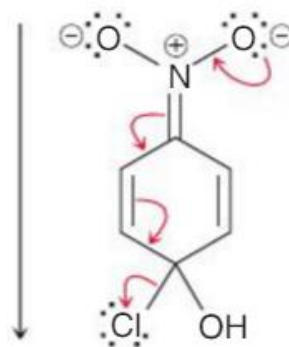


Como en el caso precedente estas nuevas flechas se pueden explicar de 2 modos

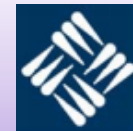
1. Por estructuras resonantes



2. Por flujo de densidad electrónica

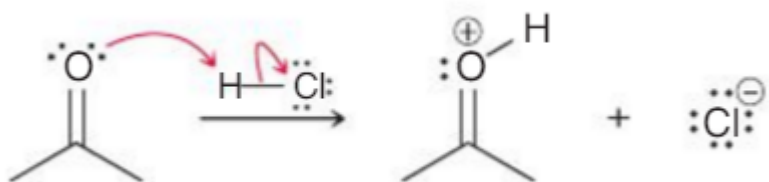


El par de electrones libre del oxígeno va empujando la densidad electrónica hasta que expulsa al grupo saliente

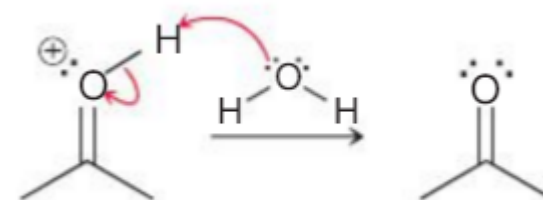


3. Transferencia de protones

Un par de electrones libres atacan a un protón (H), los electrones del enlace del protón pasan al átomo que sostiene al protón. (mínimo 2 etapas)

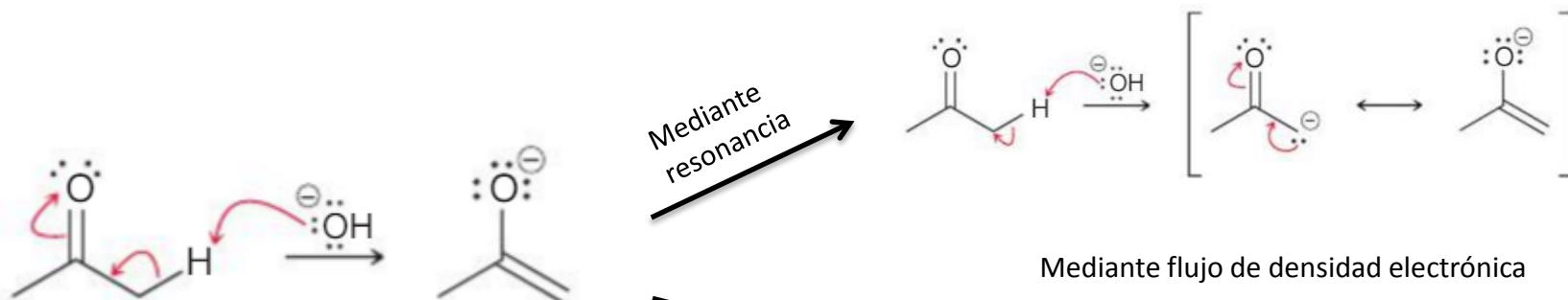


Se puede dar sobre compuestos neutros



o protonados

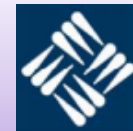
Como en los casos anteriores el proceso se puede dar con más de 2 flechas



Mediante
resonancia

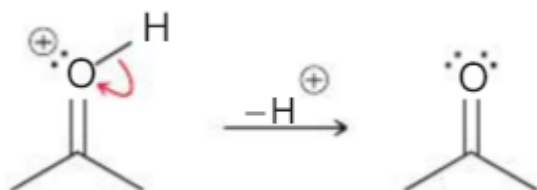
Mediante flujo de densidad electrónica

El par de electrones que soportan al H
'empujan' la densidad hasta colocarse
en el oxígeno



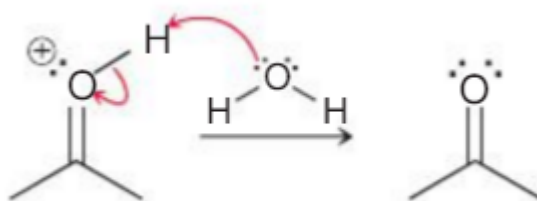
3. Transferencia de protones

Existen ocasiones donde se señala la transferencia de protones con 1 sola flecha

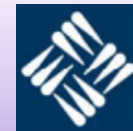


Se señala una salida del H^+

Esto se suele hacer cuando estamos en disolución acuosa, ya que la reacción real es:



Pero al ser una molécula de disolvente por comodidad (en ocasiones) se omite



4. Reordenamiento (transposición)

Existen más clases de reordenamientos, pero en este caso nos centraremos en el reordenamiento de carbocationes, transposición de carbocationes.

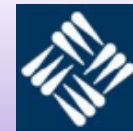
Desplazamiento de Hidruro (H) o Metilo (CH_3) desde un carbocatión a otro más estable



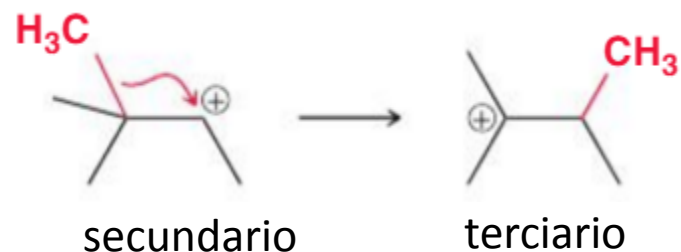
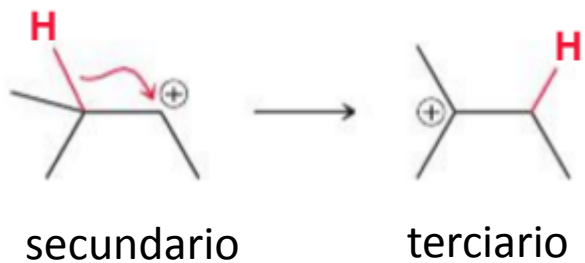
Cuanto más sustituido esta el carbocatión más estable es este



Los hidruros y metilos intentarán desplazarse para formar el carbocatión más estable

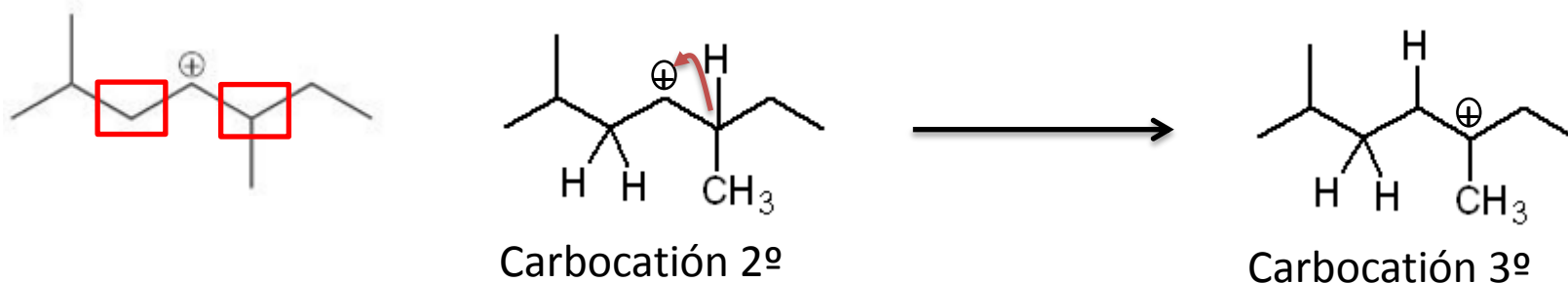


4. Reordenamiento (transposición)



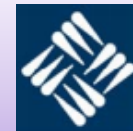
El protón y el metilo se desplazan para obtener un carbocatión 3º en vez de 2º

Un carbocatión puede sufrir reordenamiento con los H o CH₃ unidos al Carbono contiguo

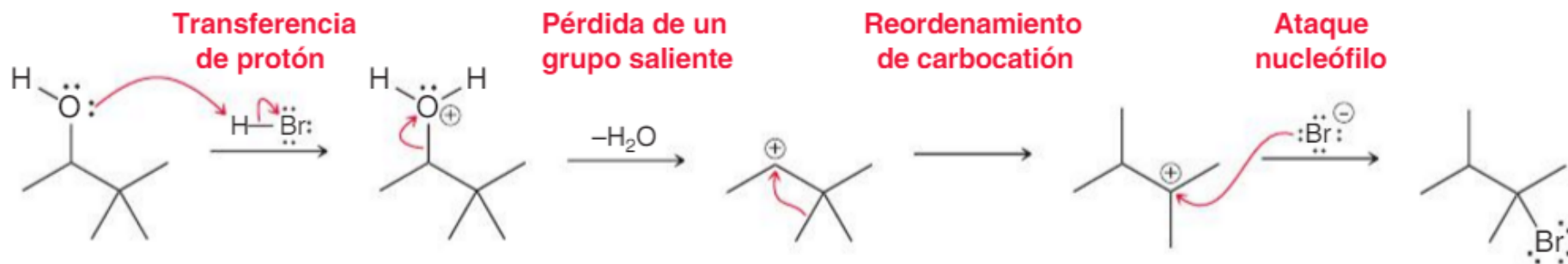
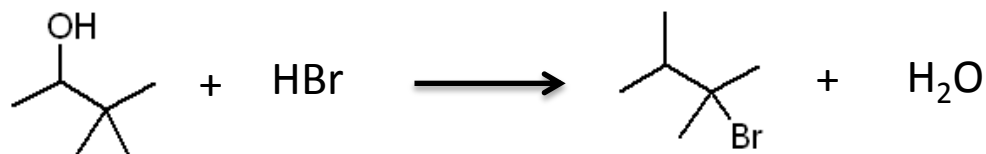


Sólo un carbocatión estabilizado por resonancia es más estable que un carbocatión 3º, por ejemplo un carbocatión alílico

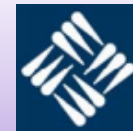
2.7 Reactividad química y mecanismos



Los mecanismos de reacción los podremos explicar en base a una combinación de los 4 patrones indicados hasta el momento



Mecanismo completo de esta reacción = suma de 4 patrones de movimiento



Recordatorio sobre las normas de utilización de flechas curvas

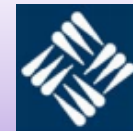
La cola de una flecha tiene que partir siempre de dos electrones (un par solitario o un enlace)
NUNCA se coloca **la cola** de una flecha en una carga (+)

La cabeza de una flecha tiene que mostrar la formación de un enlace o de un par solitario

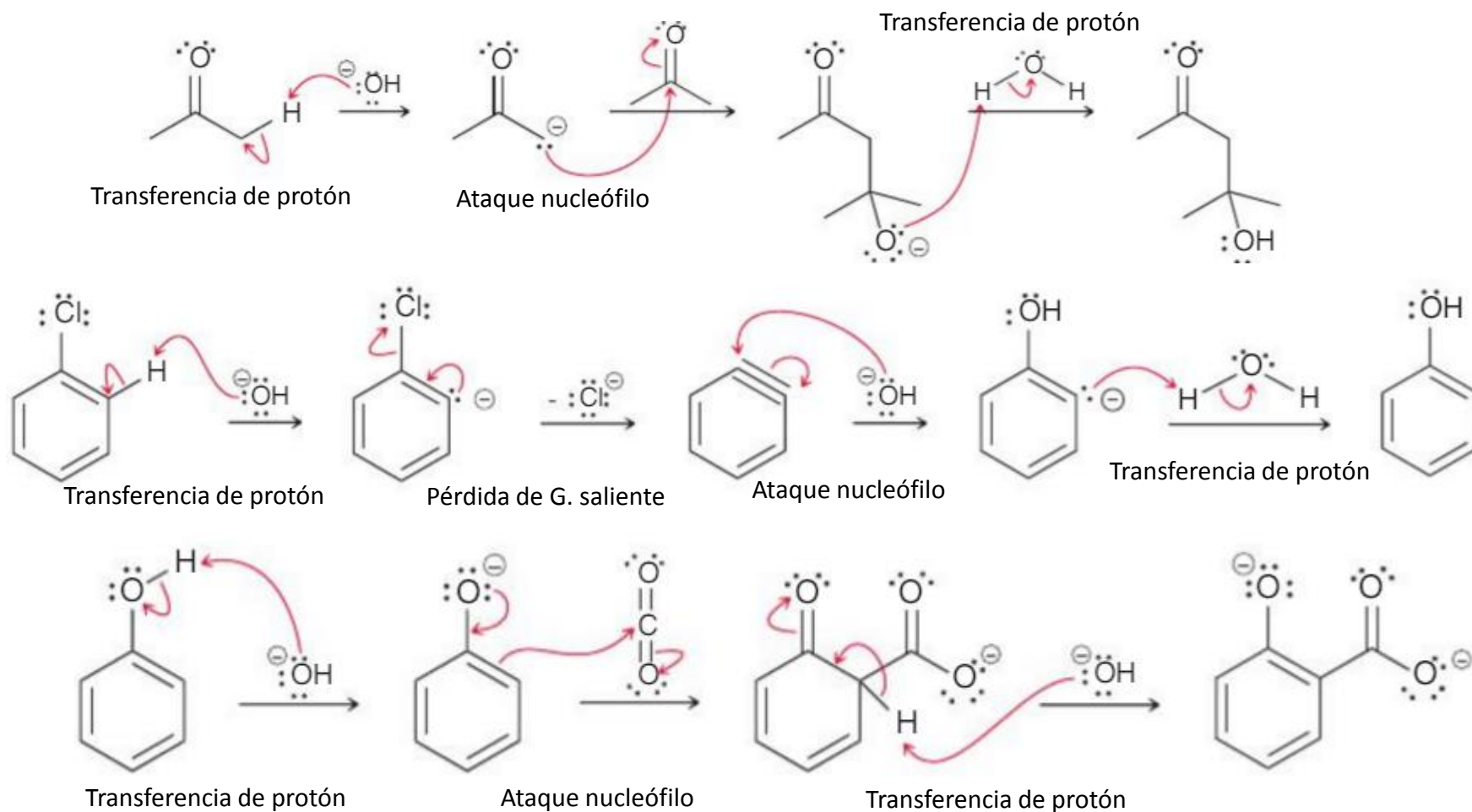
La cabeza de una flecha NUNCA tiene que violar La regla del octeto, en ocasiones aparecerá una segunda flecha para impedir violar la regla del octeto

La suma de flechas de un paso tiene que corresponder con uno de los patrones de desplazamiento característicos, si no lo cumple, esa flecha será incorrecta

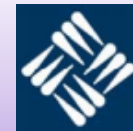
2.7 Reactividad química y mecanismos



Identificar para cada paso de reacción el patrón de desplazamiento de electrones



2.7 Reactividad química y mecanismos



Indica las flechas curvas que indican cada uno de las siguientes transformaciones

