TEMA 2. Grupos funcionales con enlaces simples.

Alcanos.
Cicloalcanos.
Grupos alquilos.
Halogenuros de alquilo.
Alcoholes.
Éteres.
Epóxidos.
Tioles.
Aminas.
Nomenclatura y propiedades.

Grupo funcional:

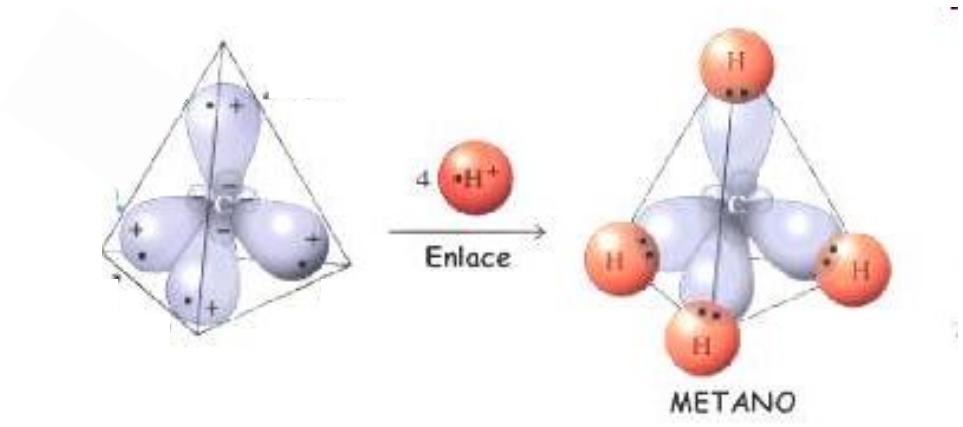
es un conjunto de átomos dentro de una molécula más grande que tiene una reactividad química característica

Alcanos

Hasta ahora hemos visto la unión del carbono con 4 hidrógenos para dar un compuesto llamado **metano**

$$CH_4$$

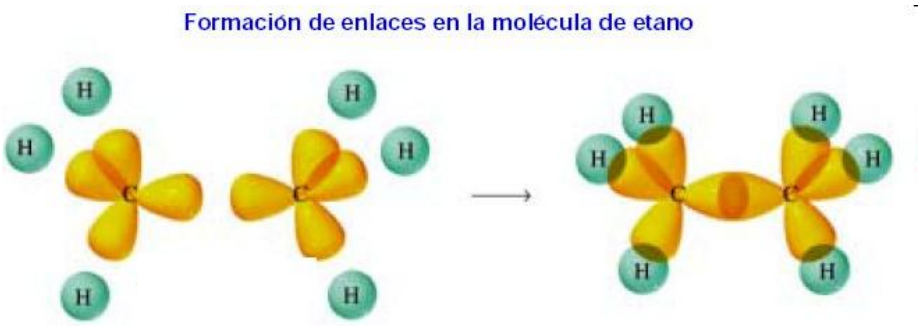
metano



….y la unión de dos carbonos a través de un enlace simple en la molécula de **etano**

$$CH_3—CH_3$$

etano



Una de las principales características del átomo de carbono es que puede formar una innumerable cantidad de uniones entre sí dando lugar a cadenas carbonadas de diferente longitud

Pero antes de continuar veamos las diferentes maneras de representar una molécula orgánica

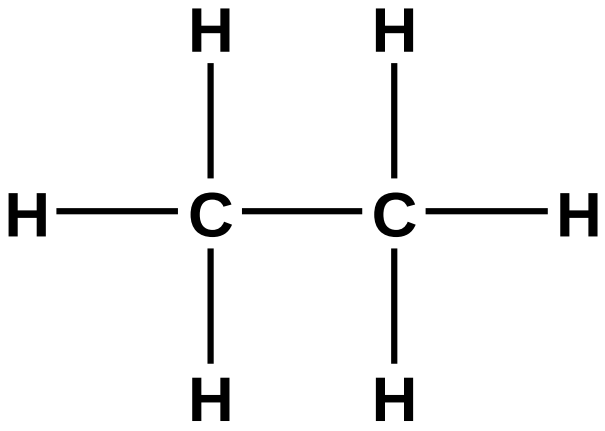
C_2H_6

Fórmula molecular mínima

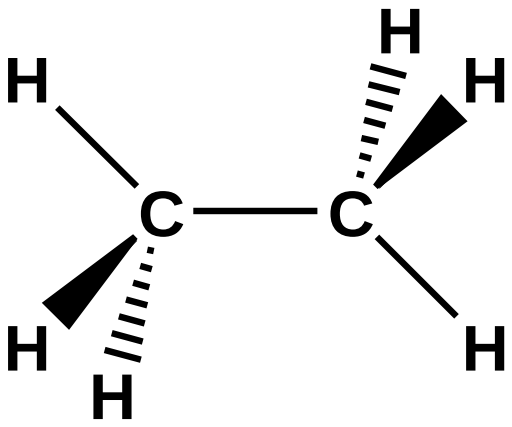
CH_3-CH_3

H_3C-CH_3

Fórmula condensada

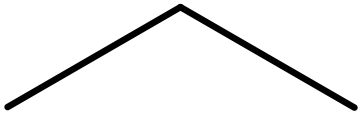


Fórmula desarrollada

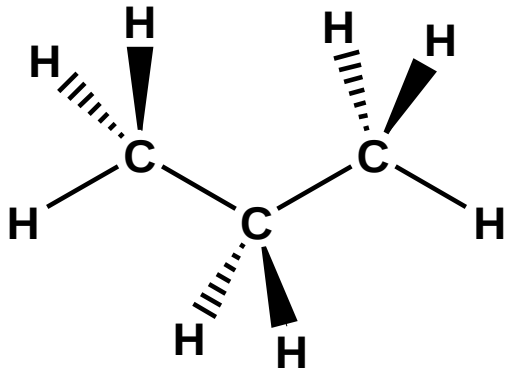


Fórmula en perspectiva

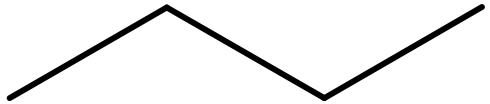
De esta manera se puede alargar la cadena

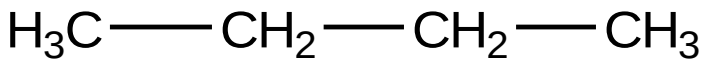


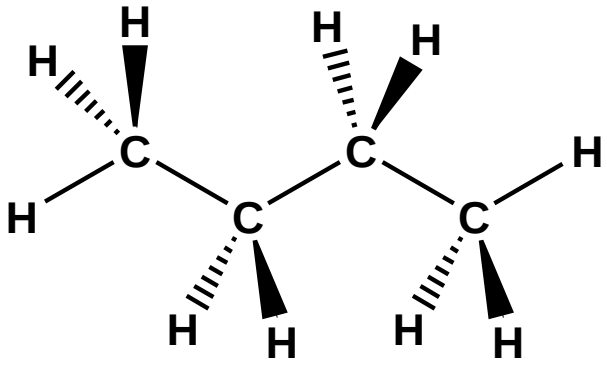




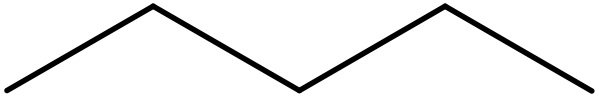
propano



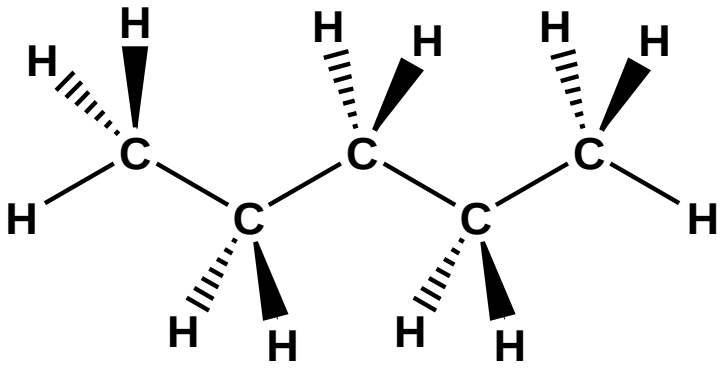




butano

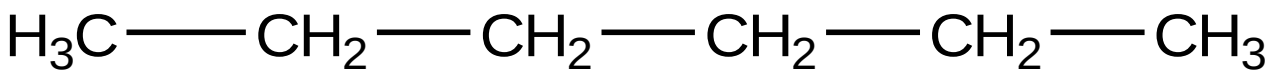


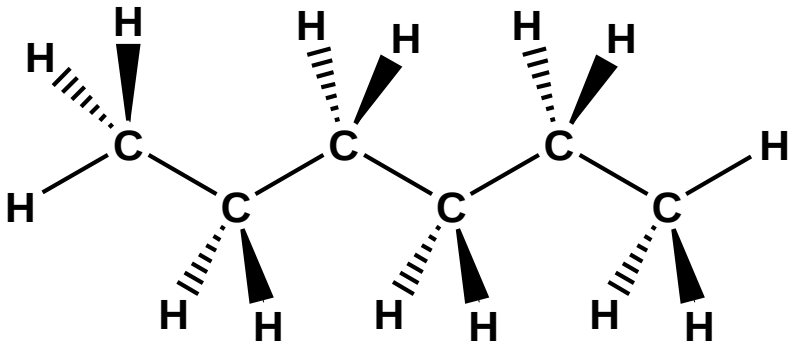
$H_3C-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3$



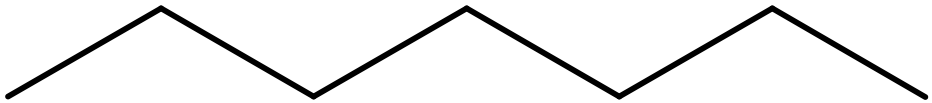
pentano



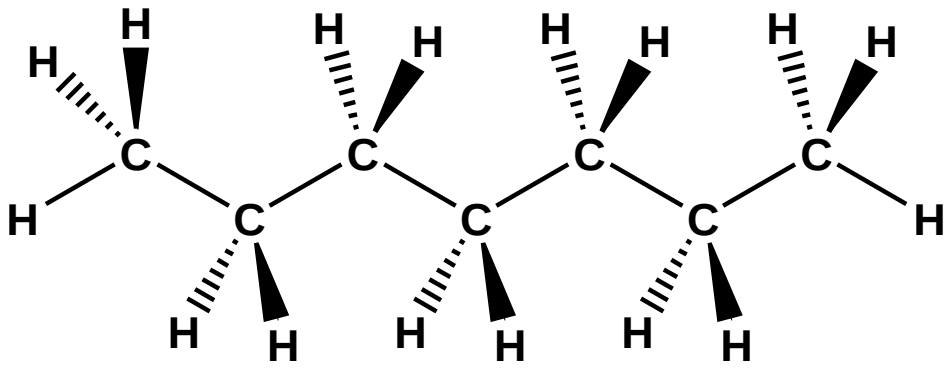




hexano



$H_3C-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3$



heptano

Nombres comunes

CH_4	metano	C_3H_8	propano
C_2H_6	etano	C_4H_{10}	butano

Nombres sistemáticos

C_5H_{12}	pentano	$C_{10}H_{22}$	decano
C_6H_{14}	hexano	$C_{11}H_{24}$	undecano
C_7H_{16}	heptano	$C_{12}H_{26}$	dodecano
C_8H_{18}	octano	$C_{15}H_{32}$	pentadecano
C_9H_{20}	nonano	$C_{20}H_{42}$	eicosano

Los alcanos (también conocidos como parafinas) son hidrocarburos que contienen solamente **simples enlaces** carbono-carbono y que presentan la fórmula molecular C_nH_{2n+2}.

Se los conoce también como hidrocarburos saturados.

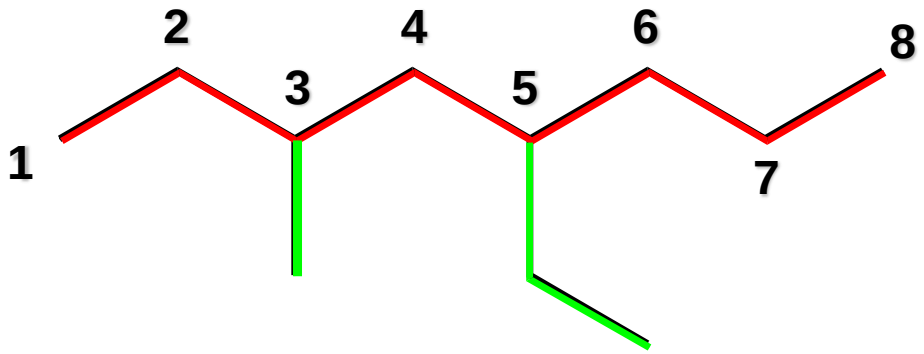
1. Nombre base

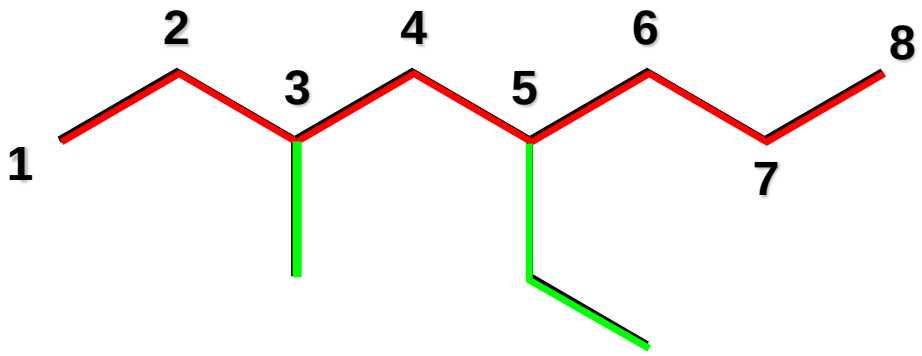
Se elige la cadena de átomos de carbono más larga, cuyo número dará origen al nombre base del compuesto.

2. Nombre de los sustituyentes

Se ubican los sustituyentes de la cadena principal

3. Se numera la cadena principal a fin de ubicar los átomos de carbono donde se unen los sustituyentes.



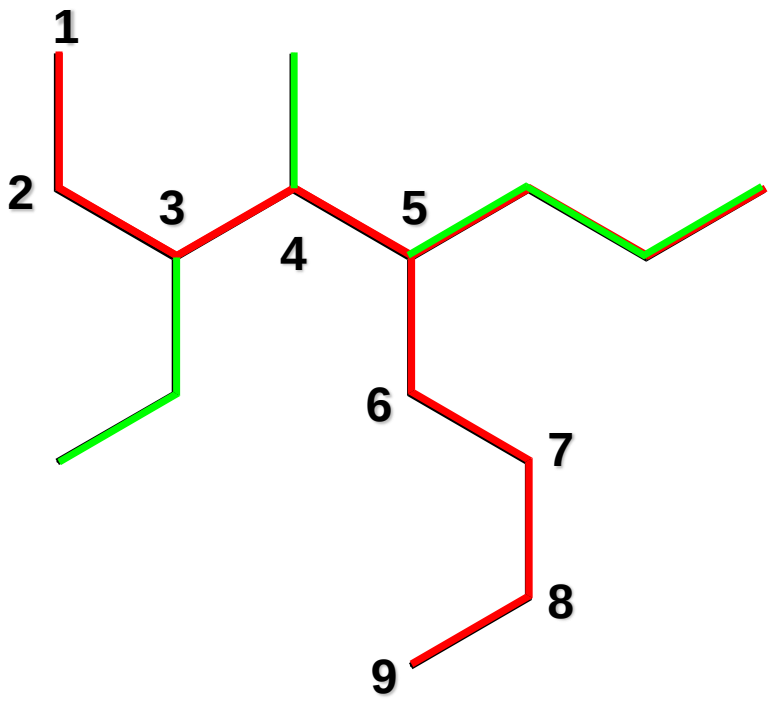


Los sustituyentes de la cadena principal se nombran precedidos por un número que indica el carbono al que está unido. Cuando se nombra un grupo alquilo se quita del nombre la *o* final. Los nombres y números se separan con guiones: 3-metil; 5-etil.

Se nombran primero los sustituyentes, por orden alfabético y ligándose el último de ellos al nombre base.

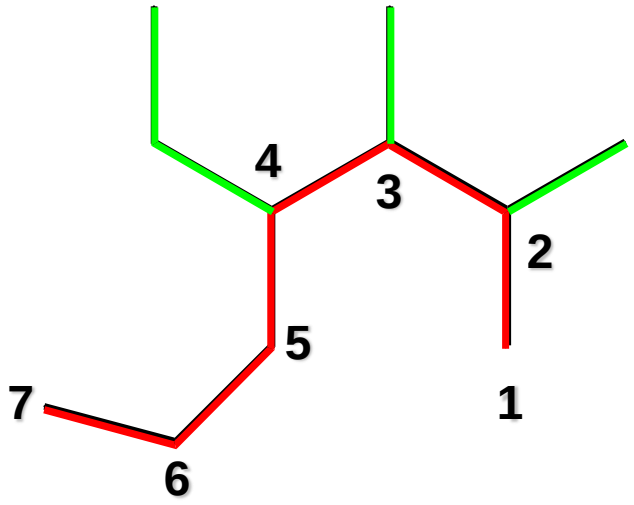
5-etil-3-metil-octano

Otro ejemplo



3-etil-4-metil-5-propilnonano

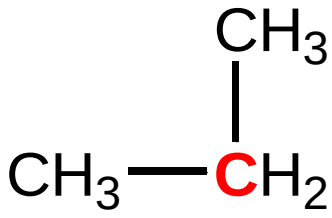
Cuando un sustituyente se repite más de una vez:
i) Se agrega un prefijo multiplicativo que indica cuántas veces se repite (di, tri, tetra, etc.).
ii) Las posiciones donde se ubican dichos sustituyentes se indican con los números ordenados en forma creciente y separados por comas.
iii) Los prefijos multiplicativos *no* se alfabetizan.



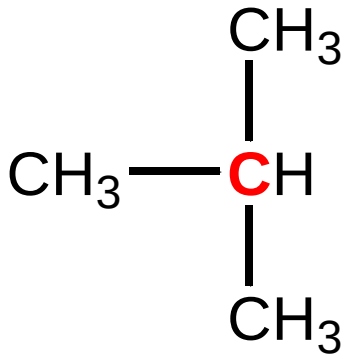
4-etil-2,3-dimetilheptano



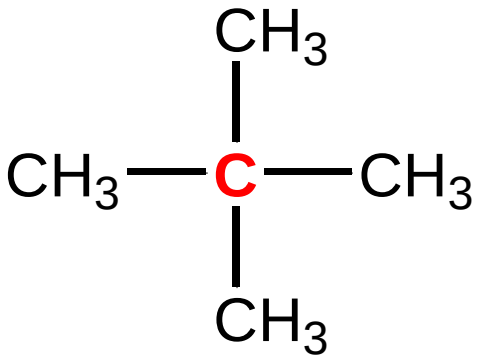
Carbono primario



Carbono secundario

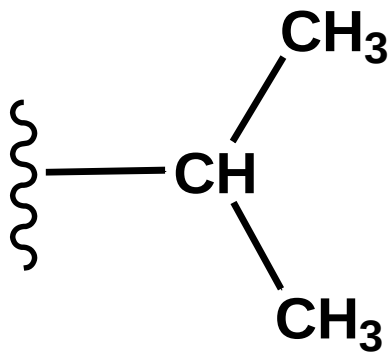


Carbono terciario

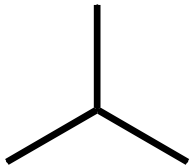


Carbono cuaternario

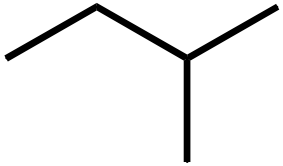
Nombres comunes



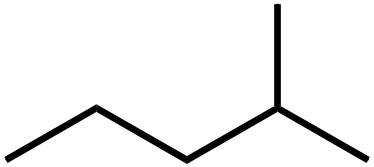
"iso"



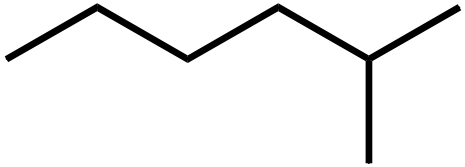
isobutano



isopentano

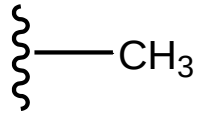


isohexano

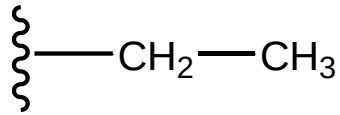


isoheptano

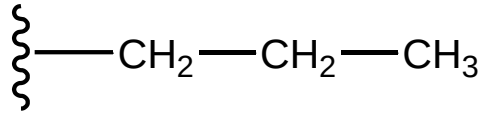
Grupos alquilos **(R)**



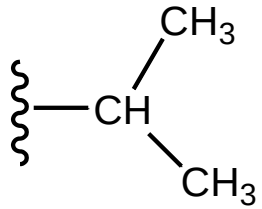
metilo



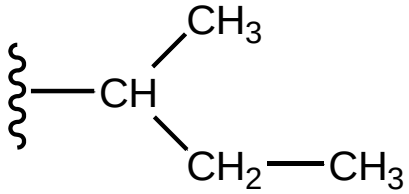
etilo



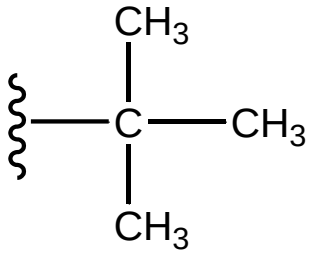
propilo



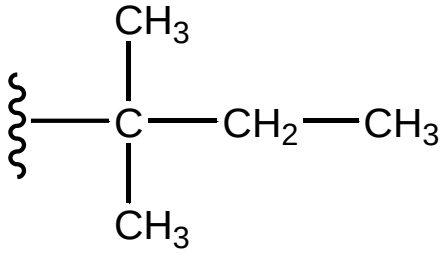
isopropilo



sec-butilo
s-butilo



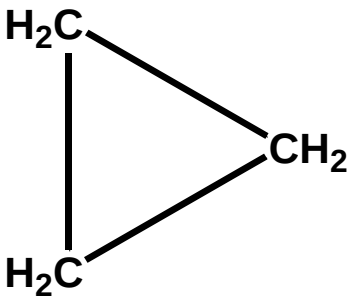
ter-butilo
t-butilo

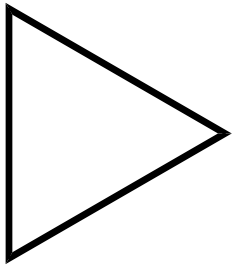


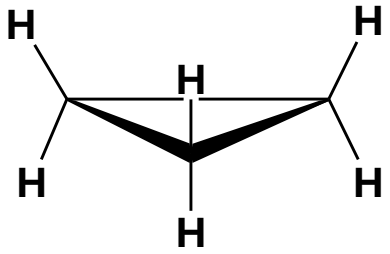
ter-pentilo
t-pentilo

Cicloalcanos

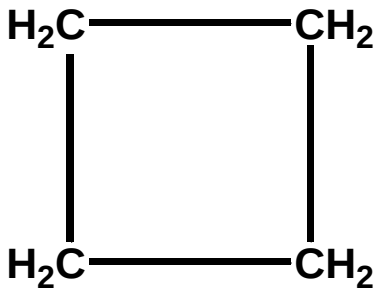
Son hidrocarburos cíclicos de fórmula general C_nH_{2n}

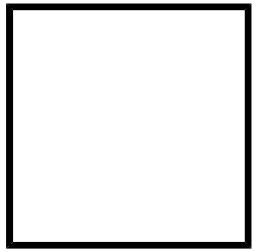


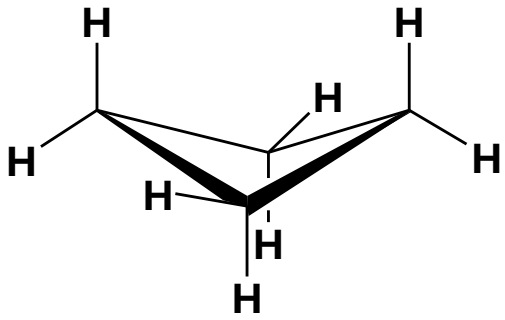




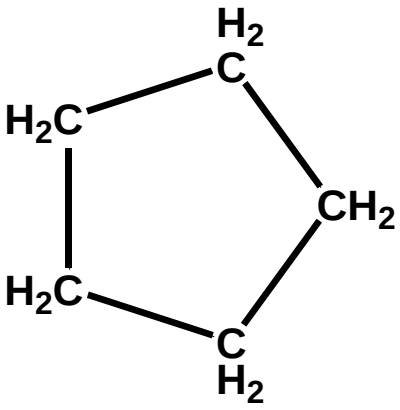
ciclopropano

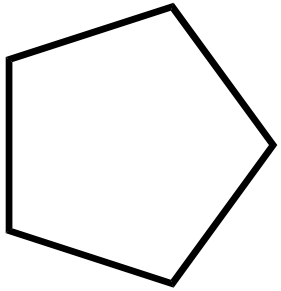


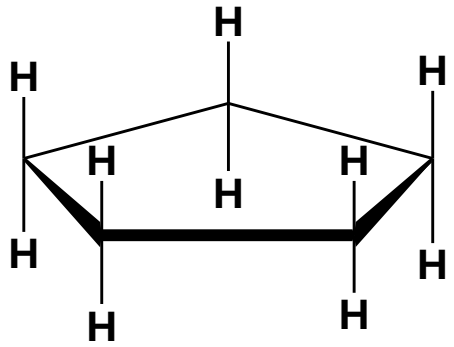




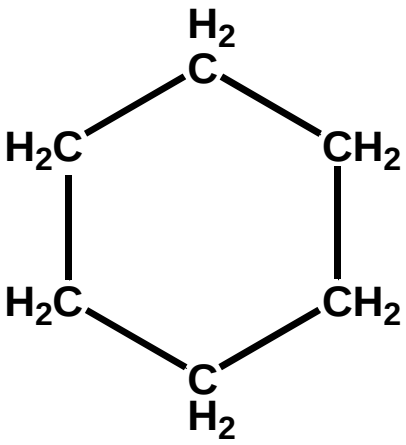
ciclobutano

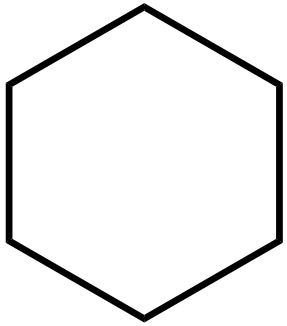


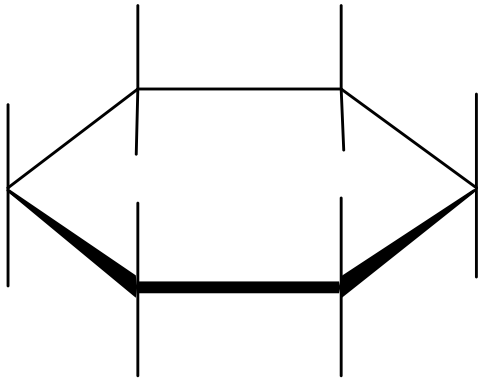


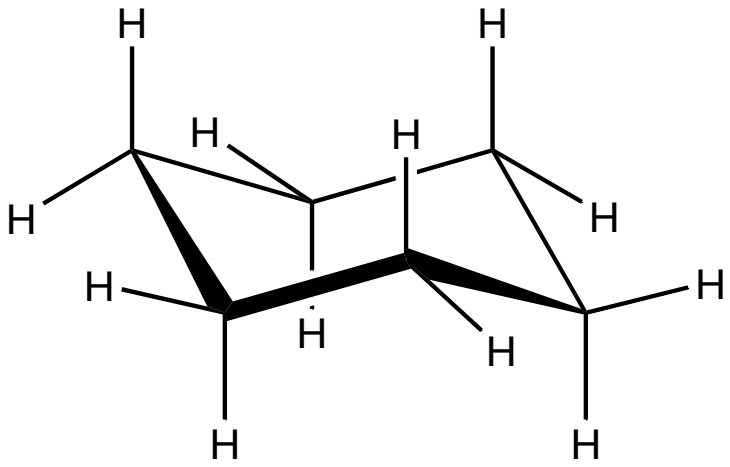


ciclopentano









ciclohexano

Características y propiedades

Metano, etano y propano se encuentran en el gas natural.

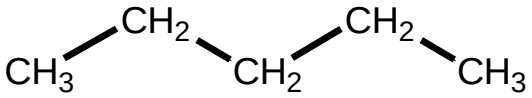
El petróleo es una mezcla líquida de muchos hidrocarburos incluyendo alcanos.

Son no polares e insolubles en agua.

Las interacciones intermoleculares se producen por uniones de **van der Waals** del tipo dipolo inducido-dipolo inducido (dipolos temporarios).

Isómeros estructurales

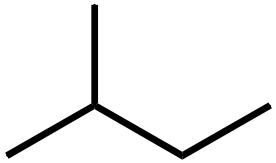


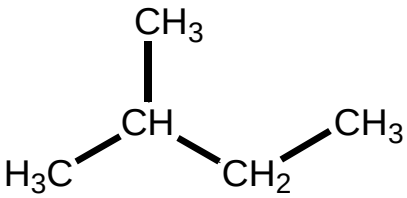


normal pentano
n-pentano

C_5H_{12}

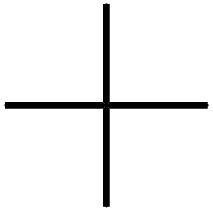
Fórmula molecular

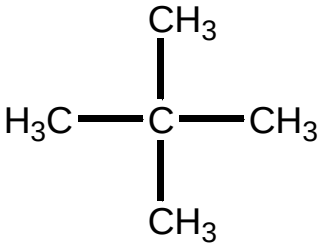




isopentano

Presentan la misma fórmula molecular mínima y peso molecular, pero diferentes propiedades tales como punto de fusión, punto de ebullición, etc

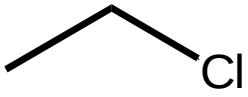




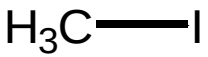
neopentano

Halogenuros de alquilo

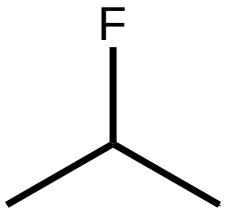
Son compuestos que presentan uno o más átomos de halógenos (F, Cl, Br ó I) unidos a un átomo de carbono. Ejemplos:



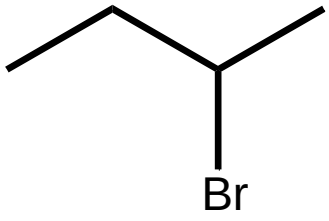
cloroetano
cloruro de etilo



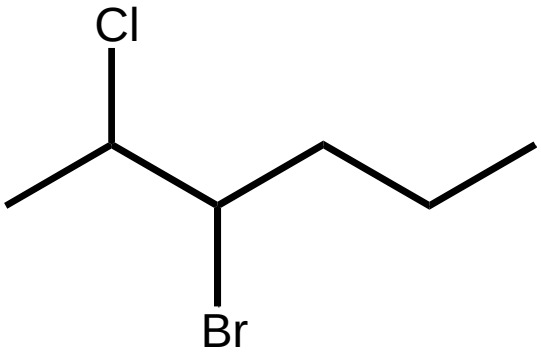
iodometano
ioduro de metilo



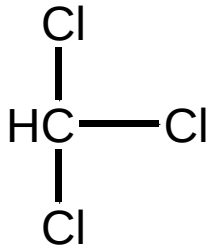
2-fluorpropano
fluoruro de isopropilo



2-bromobutano

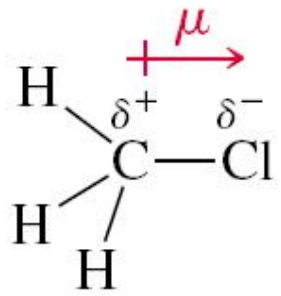


3-bromo-2-clorohexano

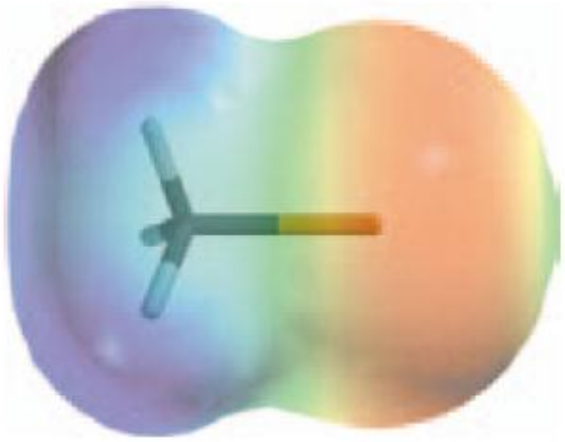


triclorometano
cloroformo

Como todos los halógenos tienen mayor electronegatividad que carbono, en los halogenuros de alquilo el enlace covalente carbono-halógeno está polarizado.



clorometano



clorometano

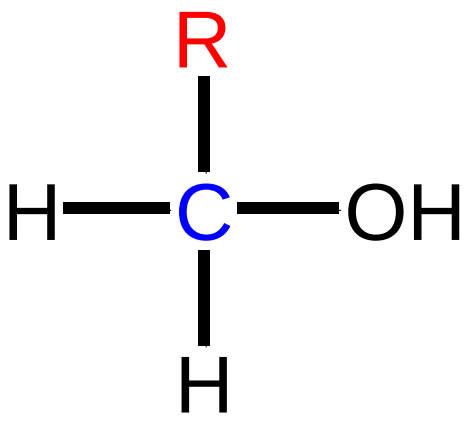
Las fuerzas de unión entre las moléculas son de tipo van der Waals a través de dipolos permanentes.

Alcoholes

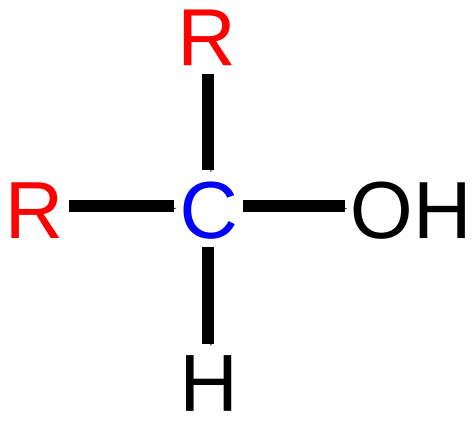
Son compuestos en los que un grupo –OH (hidroxilo u oxhidrilo) se encuentra unido a un grupo alquilo.



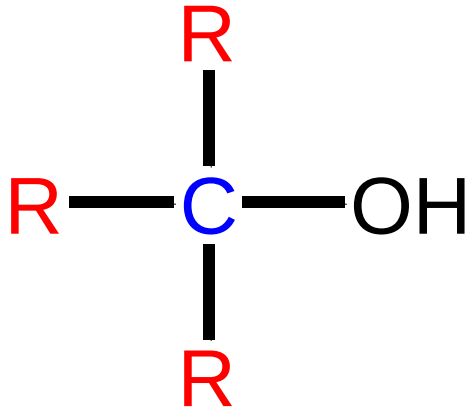
Clasificación de los alcoholes



Alcohol primario



Alcohol secundario



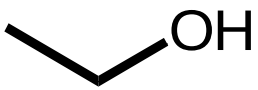
Alcohol terciario

Ejemplos

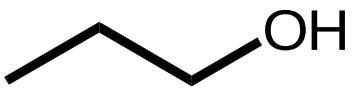


metanol
alcohol metílico

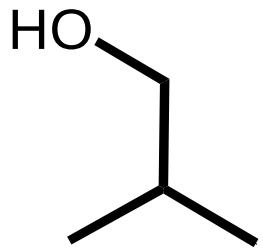
Alcoholes primarios



etanol
alcohol etílico

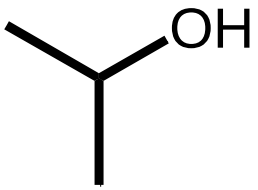


propanol
alcohol propílico

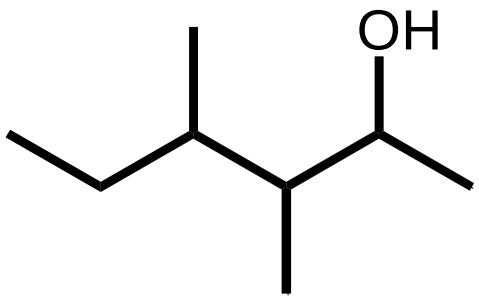


isobutanol
alcohol isobutílico

Alcoholes secundarios

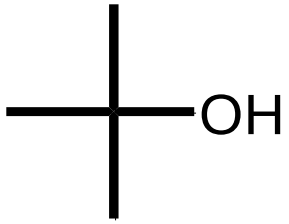


isopropanol
2-propanol
alcohol isopropílico

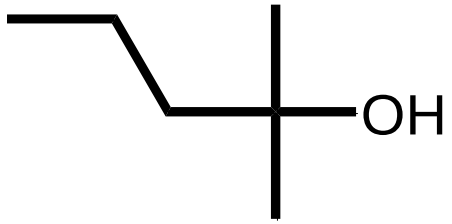


3,4-dimetil-2-hexanol

Alcoholes terciarios



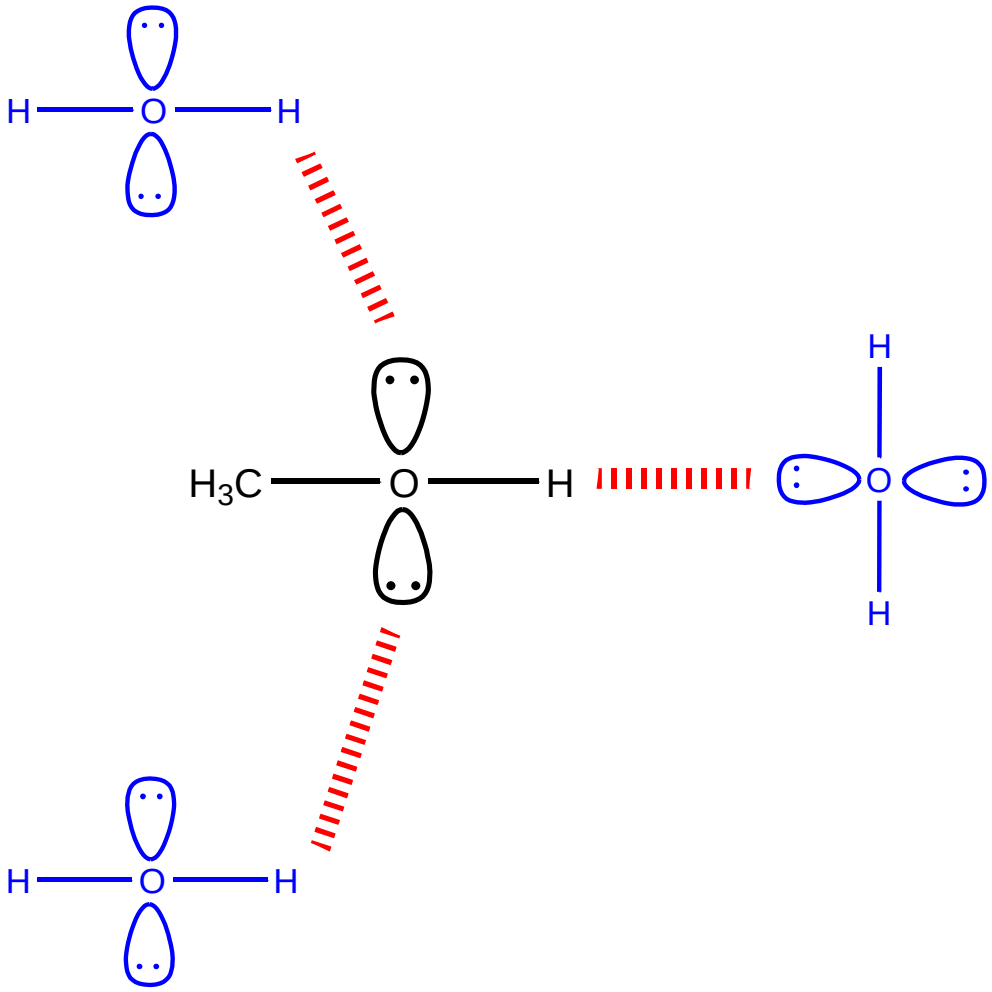
ter-butanol



1,1-dimetilbutanol

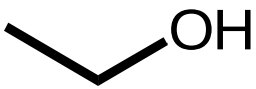
Características y propiedades

Los alcoholes de bajo peso molecular son solubles en agua porque pueden formar uniones puente de hidrógeno actuando como donor y como aceptor de hidrógeno.



A medida que aumenta la longitud de la cadena carbonada, se vuelven más insolubles en agua y más solubles en solventes orgánicos.

El metanol (CH_3OH) es el alcohol de menor peso molecular, es decir, el primero de la serie. Es inflamable y en el organismo resulta altamente tóxico. En concentraciones elevadas el metanol puede causar dolor de cabeza, mareo, náusea, vómitos y muerte. Una exposición aguda puede causar ceguera o pérdida de la visión, ya que puede dañar seriamente el nervio óptico. Una exposición crónica puede ser causa de daños al hígado o de cirrosis.



El etanol (CH_3CH_2OH) es un líquido incoloro, inflamable, con un punto de ebullición de 78ºC.

Tiene una alta solubilidad en agua en cualquier proporción.

Se utiliza como combustible doméstico y en automóviles (bioetanol) ya que no produce un impacto ambiental tan marcado como el uso de combustibles fósiles (petróleo).



En la industria de los perfumes se utiliza como disolvente



El etanol al 70% se usa como agente desinfectante (por ejemplo en el alcohol en gel).



Se encuentra en las bebidas alcohólicas como producto de fermentación microbiana.

Vino ~ 13-15%
Cerveza ~ 5-7 %
Fernet ~ 43%
Licores hasta ~ 50%



El etanol aporta energía al organismo de una manera bastante directa al oxidarse y entrar en el *ciclo del ácido cítrico* o *ciclo de Krebs*.

La unidad de energía que se emplea para calcular las necesidades o el aporte de energía es la ***kilocaloría*** (Kcal) llamada también **caloría nutricional** (cal) que se define como:

Kcal: cantidad de energía en forma de calor que se necesita para elevar la temperatura de 1 litro de agua en un grado centígrado, desde 15 a 16ºC.

Desventajas del consumo excesivo de bebidas alcohólicas:

Efectos nocivos sociales y económicos.

El exceso de etanol se convierte en grasas por una vía metabólica llamada *vía del acetilCoA.*

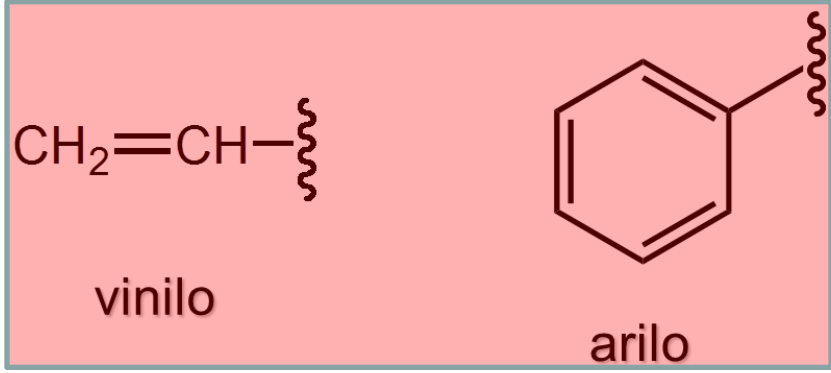
No puede convertirse en glucosa o glucógeno para almacenarse de esta manera.

Produce hipoglucemia ya que inhibe la *gluconeogénesis.*

Éteres

Son compuestos orgánicos con un átomo de oxígeno unido a dos grupos que pueden ser alquilos, o arilo o vinilo.

Ejemplos de éteres





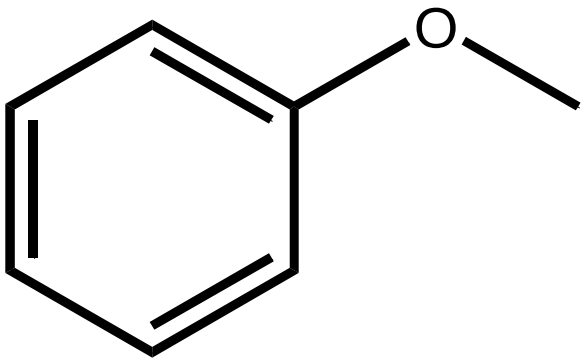
Dimetiléter
Éter dimetílico



Etilmetiléter
Éter etilmetílico



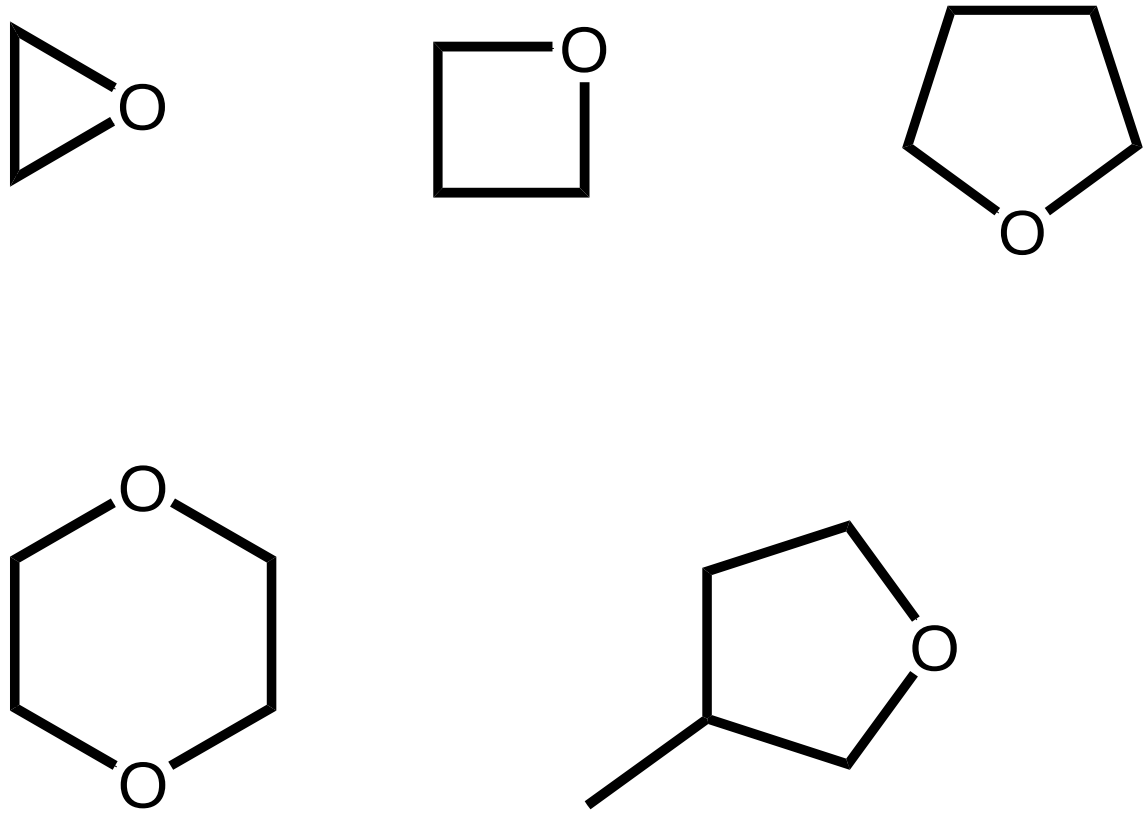
Metilviniléter
Éter metilvinílico



Fenilmetiléter
Éter fenilmetílico

Epóxidos

Son éteres cíclicos. Ejemplos



Tioles

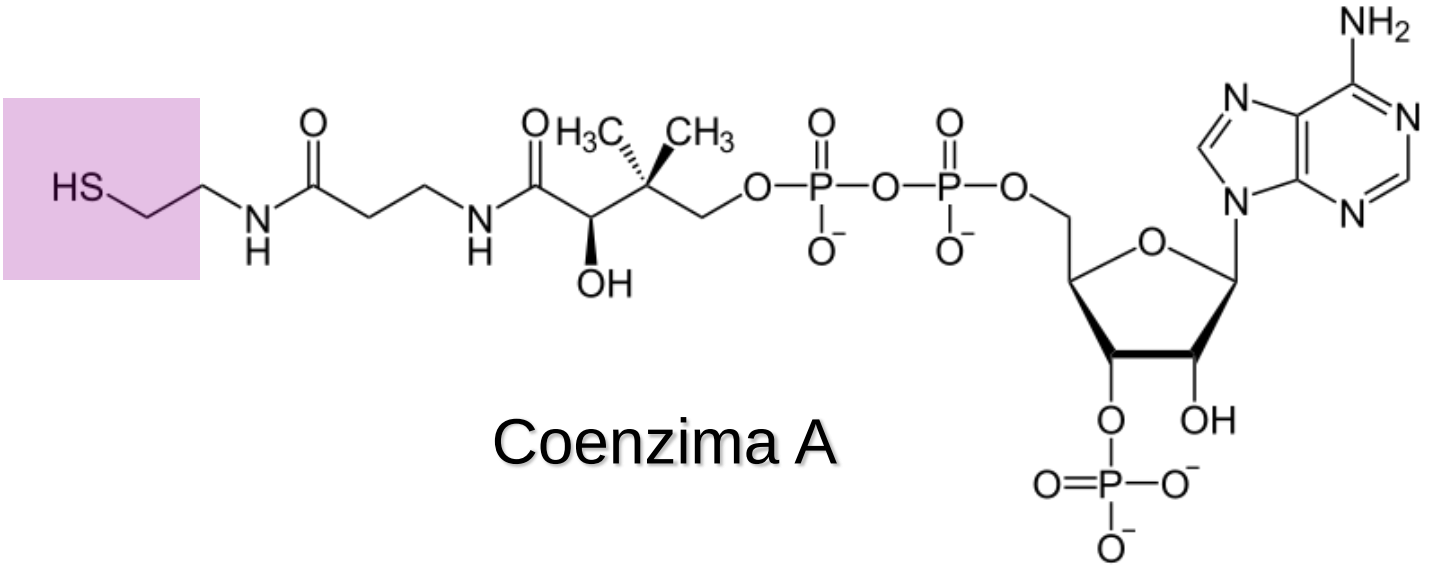
En los tioles, un grupo *sulfidrilo* o *mercapto*, -SH, se une a un grupo alquilo.

Se consideran los análogos azufrados de los alcoholes

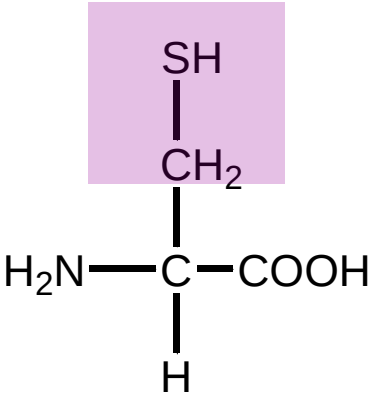
CH_3-CH_2-SH

etanotiol
etilmercaptano

Ejemplos de tioles de interés biológico



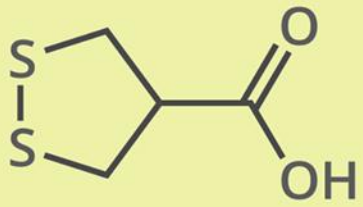
Coenzima A



Aminoácido cisteína

Ejemplo de compuestos azufrados : ácido asparagusico

ASPARAGUSIC ACID



ASPARAGUSIC ACID

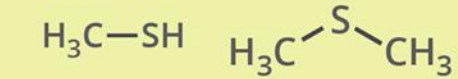
Asparagusic acid is a type of organosulfur compound which also contains a carboxylic acid group. It is seemingly unique to asparagus and not found in other related vegetables.

It has been hypothesised that the breakdown of asparagusic acid into a variety of compounds, shown to the right, could be responsible for the odour detected in the urine of some people after eating asparagus.

Strangely, research has suggested that some people who secrete the compounds in their urine can't smell them, whilst some people don't secrete the compounds but can smell them in the urine of others. It is currently unknown as to whether this complicated combination of traits has a simple genetic basis.

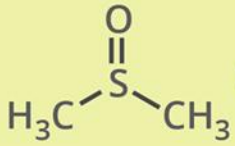


¿Por qué el espárrago hace que la orina presente un olor particular? Estas podrían ser las moléculas responsables del olor.

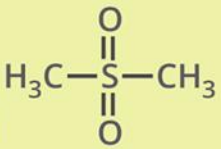


METHANETHIOL

DIMETHYL SULFIDE



DIMETHYL SULFOXIDE



DIMETHYL SULFONE

All four of the compounds on the left have been identified as being probable contributors to the smell of urine after eating asparagus.

It has been suggested by several studies that methanethiol & dimethyl sulfide are the primary odour-causing compounds, whilst dimethyl sulfoxide & dimethyl sulfone modify the smell to give a 'sweet' aroma.

© COMPOUND INTEREST 2014 - WWW.COMPOUNDCHEM.COM
SHARED UNDER A CREATIVE COMMONS ATTRIBUTION-NONCOMMERCIAL-NODERIVATIVES 4.0 INTERNATIONAL LICENCE

Aroma Chemistry

THE AROMA OF COFFEE

COFFEE BEANS & COFFEE BREW

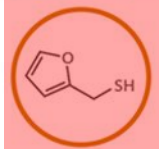
ROASTED COFFEE BEANS CONTAIN OVER
1000 CHEMICAL COMPOUNDS

EXTRACTION YIELDS DURING COFFEE BREWING
NON-POLAR COMPOUNDS: 10-25%
POLAR COMPOUNDS: 75-100%

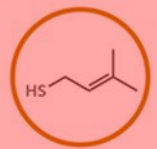


Not all compounds in coffee beans are extracted during brewing. Polar molecules are more soluble in water; they arise when uneven sharing of electrons between atoms leads to the two ends of a molecule having slight electrical charges.

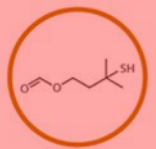
A SELECTION OF AROMA COMPOUNDS IN BREWED COFFEE



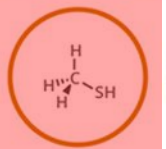
2-FURFURYLTHIOL
roasted (coffee)



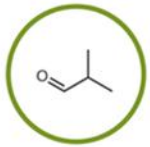
3-METHYL-2-BUTEN-1-THIOL
amine-like, sulfurous



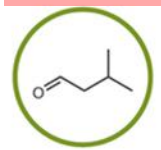
3-MERCAPTO-3-METHYLBUTYLFORMATE
catty, roasted



METHANETHIOL
rotten cabbage



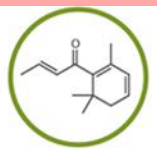
METHYLPROPANAL
floral, spicy



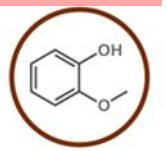
3-METHYLBUTANAL
fruity, malty



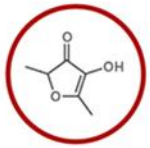
ACETALDEHYDE
pungent, fruity



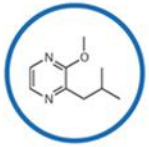
(E)-Β-DAMASCENONE
honey, fruit-like



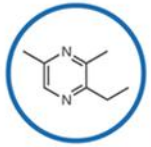
GUAIACOL
smoky, spicy



FURANEOL
sweet, caramel



2-ISOBUTYL-3-METHOXYPYRAZINE
earthy



2-ETHYL-3,5-DIMETHYLPYRAZINE
earthy, roasted

KEY
- Sulfur-containing
- Aldehydes & ketones
- Phenolic
- Furans
- Pyrazines

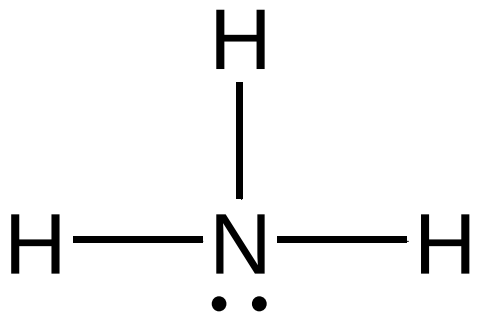
Coffee contains several hundred different chemical compounds, but only a minority of these contribute to the aroma. A compound's contribution to aroma is dependent on both its concentration and the threshold at which its smell can be perceived by humans. There are also variances in chemical composition for different coffee beans, leading to the variety of differing tastes and aromas.

© COMPOUND INTEREST 2015 - WWW.COMPOUNDCHEM.COM | @COMPOUNDCHEM
Shared under a Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives licence.

Aminas

Las aminas pueden considerarse como compuestos orgánicos derivados del amoníaco (NH_3), en el que se sustituyen 1 o más de los hidrógenos por un grupo alquilo, vinilo o arilo.

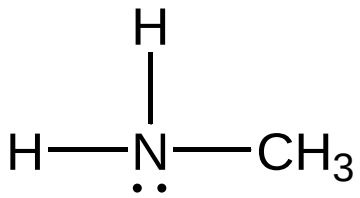
La mayoría son líquidos polares con un olor desagradable



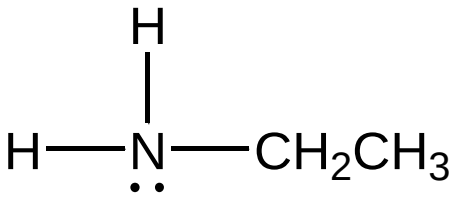
amoníaco

Se clasifican según la cantidad de grupos sustituyentes que presentan en aminas primarias, secundarias y terciarias. Ejemplos:

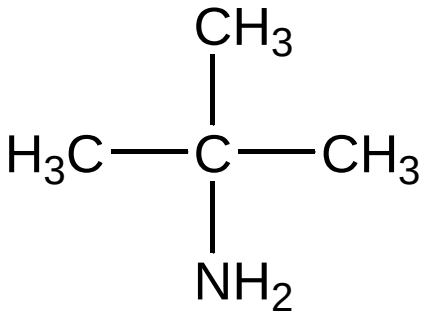
Aminas primarias



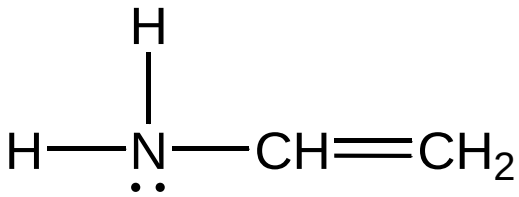
metilamina



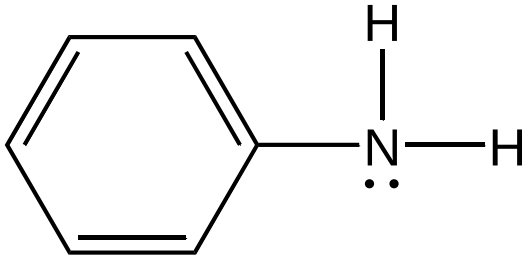
etilamina



t-butilamina

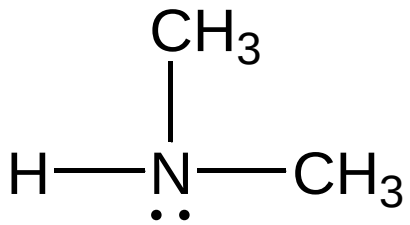


vinilamina

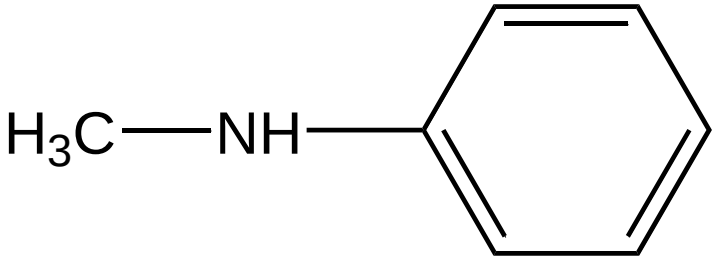


anilina

Aminas secundarias

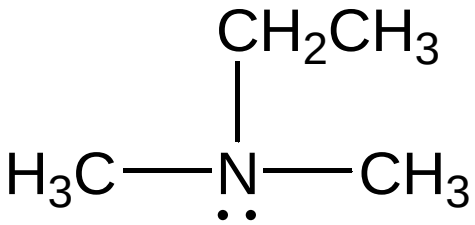


dimetilamina

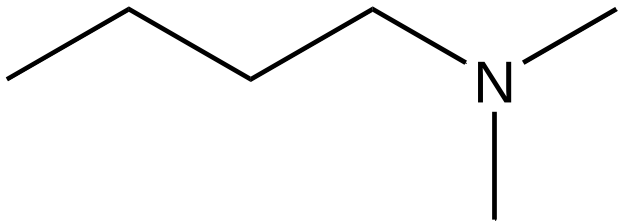


fenilmetilamina

Aminas terciarias



N,N-dimetiletilamina



N,N-dimetilbutilamina

THE CHEMISTRY OF THE SMELL OF DECOMPOSITION

THE STAGES OF DECOMPOSITION

1 *Fresh* 2 *Bloated* 3 *Active Decay* 4 *Advanced Decay*

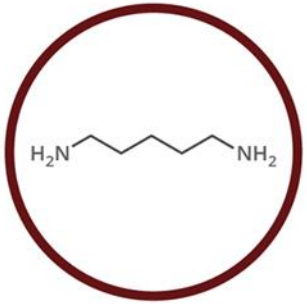
1. Fresh Stage: begins almost immediately; enzymatic breakdown of cells & tissue (autolysis) begins. Visible signs limited. **2. Bloated Stage:** metabolic activity of bacteria produces gases, causing the carcass to inflate & swell. Pressure forces fluids from natural orifices, producing strong odours. **3. Active Decay:** liquefaction and disintegration of tissues observed. Odours persist. **4. Advanced Decay:** decomposition rate decreases due to loss of mass. Eventually, dry remains are all that remain.



400+ VOLATILE COMPOUNDS

Decomposition is a complicated process, and varies depending on conditions. A wide range of chemical compounds are produced, many more than can be shown here, though not all of them will contribute to odour.

A Selection of Odour-Causing Chemicals in the Decay Process

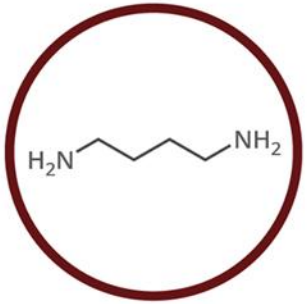


Cadaverine

(pentane-1,5-diamine)

SMELL
FOUL, ROTTING FLESH

Also partly responsible for the distinctive odours of urine & semen.

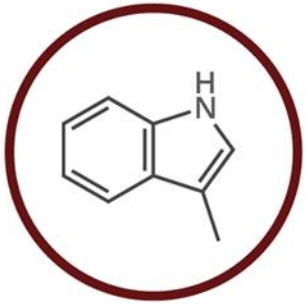


Putrescine

(butane-1,4-diamine)

SMELL
PUTRIFIED FLESH, GARBAGE

Along with cadaverine, putrescine also contributes to bad breath.

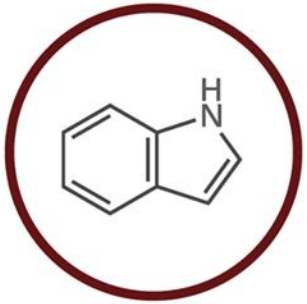


Skatole

(3-methylindole)

SMELL
STRONG FAECAL ODOUR

Also found in human faeces. Has a flowery smell at low concentrations.



Indole

(indole)

SMELL
PUNGENT, MUSTY, STALE

Like skatole, occurs in faeces, but used in low concentrations in flower scents & perfumes.

© COMPOUND INTEREST 2014 - WWW.COMPOUNDCHEM.COM | Twitter: @compoundchem | Facebook: www.facebook.com/compoundchem
Shared under a Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives licence.

Las aminas de bajo peso molecular (hasta cuatro átomos de carbono) son solubles en agua. Las de mayor peso molecular son insolubles o ligeramente solubles en agua.

Las aminas primarias y secundarias pueden formar uniones puente de hidrógeno actuando como dadoras de hidrógeno (ya que presentan enlaces N-H fuertemente polarizados) o como aceptoras de hidrógeno, ya que presentan un par de electrones libres.

Las aminas terciarias sólo pueden actuar como aceptoras de hidrógeno.