## Química Preu.JCT

# G18 Grupos Funcionales

## Funciones orgánicas.

Una función orgánica o grupo funcional es un átomo o grupo de átomos que se encuentra dentro de una molécula orgánica y que le confiere a esta propiedades físicas y químicas características.

> Utilizamos Grupos Funcionales ya que nos permiten clasificar compuestos, determinan las propiedades físicas y reactividad química, y su identificación.

#### Alcoholes.

La estructura de un alcohol se asemeja a la del agua puesto que un alcohol procede de la sustitución formal de uno de los hidrógenos del agua por un grupo alquilo. En el agua el ángulo del enlace H-O-H es de 104.5° y el ángulo que forman los dos pares de electrones no compartidos es de 114°.

Tipo	Estructura	Ejemplo	Nombre
Alcohol primario	CH <sub>2</sub> -R HO	H <sub>3</sub> C—OH	Metanol
Alcohol secundario	R CH R OH	CH <sub>2</sub> —HC  H <sub>3</sub> C  CH <sub>3</sub>	2-butanol
Alcohol Terciario	OH R C R	H <sub>3</sub> C CH <sub>3</sub> C OH H <sub>3</sub> C	2-metil-2-propanol

## Éteres.

Los éteres son compuestos de fórmula R - O - R' en la que R y R' pueden ser grupos alquilo o arilo (fenilo). Los éteres podrían considerarse derivados del agua, por simple sustitución de los átomos de hidrógeno por grupos alquilo.

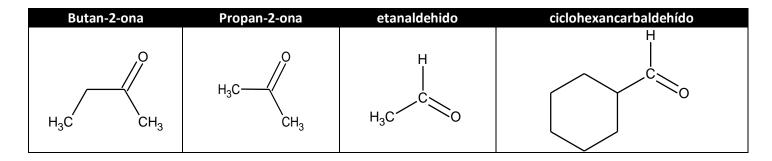
En la siguiente figura se indican, a modo de comparación, las estructuras del agua, el metanol y el dimetil éter.

dietil éter	eter ter-butil metílico
$H_3C$ $O$ $CH_3$ $CH_2$	CH <sub>3</sub> H <sub>3</sub> C—C—O CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>

## Aldehídos y cetonas.

Los aldehídos y cetonas, junto con los ácidos carboxílicos, los ésteres, las amidas y los cloruros de ácido, se caracterizan por contener en su estructura el grupo funcional carbonilo (C = O).

El átomo de carbono y el átomo de oxígeno que forman el grupo carbonilo se encuentran unidos mediante dos enlaces: uno  $\sigma$  y otro  $\pi$ . El átomo de carbono del grupo carbonilo presenta hibridación  $sp^2$  y está enlazado al átomo de oxígeno y a otros dos átomos mediante tres enlaces  $\sigma$  coplanares, separados entre sí 120°. El segundo enlace entre el carbono y el oxígeno, el enlace  $\pi$ , se forma por solapamiento del orbital p no hibridado del carbono con un orbital p del átomo de oxígeno. El doble enlace entre el carbono y el oxígeno es semejante en su estructura orbitálica al doble enlace de los alquenos, aunque el doble enlace del grupo carbonilo es un poco más corto y fuerte.



## 3.2 Aminas.

Se pueden considerar a las aminas como compuestos nitrogenados derivados del amoniaco:  $NH_3$  en el que uno o más grupos alquilo o arilo están unidos al nitrógeno. El átomo de nitrógeno de la molécula de amoniaco contiene un par electrónico libre, de manera que la forma de esta molécula, considerando en ella al par de electrones no enlazantes, es tetraédrica ligeramente distorsionada. El par aislado de electrones no enlazantes ocupa una de las posiciones tetraédricas. El ángulo del enlace H-N-H del amoniaco es de 107°, y tanto la forma de la molécula como el valor anterior se pueden explicar admitiendo una hibridación  $sp^3$  en el átomo de nitrógeno. El par electrónico libre provoca una compresión del ángulo que forman entre sí los orbitales híbridos  $sp^3$ , reduciéndolo de 109° a 107° grados.

1-butanamina	2-butanamina	3-metil-1-butanamina	N-metil-2-butanamina
CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> NH <sub>2</sub>	H <sub>3</sub> C CH CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> CH NH <sub>2</sub> CH CH CH CH <sub>3</sub>	H <sub>3</sub> C CH CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>

## 3.3 Ácidos carboxílicos y derivados.

A los compuestos que contienen el grupo carboxilo (abreviado -COOH o  $-CO_2H$ ) se les denomina ácidos carboxílicos. El grupo carboxilo es el origen de una serie de compuestos orgánicos entre los que se encuentran los haluros de ácido RCOCI, los anhídridos de ácido RCOCOR, los ésteres RCOOR, y las amidas  $RCONH_2$ .

Ácido butanoico	Metilacetato	Etanamida	Ácido acético	Metanamida
0,	O-CH <sub>3</sub>	$NH_2$	OH	$NH_2$
C—CH <sub>2</sub>	o=c(	o=c(	o=c(	o=c(
HO CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	`CH₃	`CH <sub>3</sub>	Н	Н

#### 3.4 Aromáticos

Normalmente hablamos de compuestos aromáticos a especies químicas constituidas por benceno, pero el concepto puede ser más amplio

Benceno	Naftaleno	Antraceno	Fenaltreno	Pireno

y debemos conocer que las orientaciones en el espacio de los sustituyentes tienen nombres especiales.

Orto	Meta	Para
1-2	1-3	1 - 4
o-diclorobenceno	m-diclorobenceno	p-diclorobenceno
CI 6 1 2 CI 5 4	6 1 2 5 CI	CI 2 5 4 3 CI

#### 4 Isómeros

Un isómero es una estructura química que comparte algo en común con otra.

Clásicamente se habla similar formula molecular o espacial, aunque actualmente es más extenso el concepto (bioisósteros, que tienen actividad similar a nivel biológico).

Los Isómeros estructurales presentan la misma fórmula molecular y tienen diferente distribución de los enlaces entre sus átomos mientras que los Isómeros espaciales tienen igual distribución de los enlaces entre sus átomos, pero su disposición espacial es diferente.

#### 4.1 Isomería de cadena.

Tienen los componentes de la cadena acomodados de diferente forma.

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

2-metilpropano y butano

## 4.2 Isomería de posición.

Los grupos funcionales están unidos en diferentes posiciones.

HO 
$$CH-CH_3$$
  $H_3C$   $CH_2$   $CH_2$   $CH_2$   $CH_2$ 

2-hidroxipropano (2-propanol) y 1-hidroxipropano (1-propanol)

## 4.3 Isomería de grupo funcional.

Tienen distintos grupos funcionales.

Alcano cíclico (ciclohexano) y alqueno (2-hexeno).

## 4.4 Isómeros conformacionales.

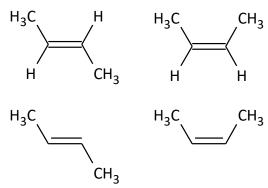
Existen isoformas de distinta energía que se forman por rotación en torno a un eje de carbono  $sp_3$  y son representadas con proyecciones de Newman.

Forma eclipsada y alternada de etano

Las estructuras más estables son las que no se molestan, y por lo tanto las que ocupan el mayor espacio para no interactuar con otras (impedimento estérico)

## 4.5 Isómeras configuracionales.

En torno a un enlace doble (carbono  $sp_2$ ) se orientan espacialmente de forma de bote (cis) o silla (trans) las sustancias, poseen reactividad química distinta.

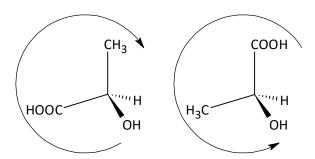


trans-butano y cis-butano

#### 4.6 Enantiómeros.

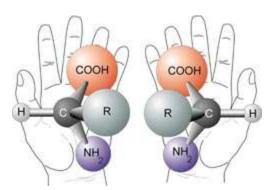
Los constituyentes están dispuestos en orden distinto en torno a un carbono (alfa), originando estructuras con actividad óptica (quiralidad).

Las sustancias se presentan normalmente en mesclas de estas estructuras quirales, lo que se denomina mezcla racémica.



Forma R y S de ácido 2- hidroxipropanoico.

Todos los aminoácidos presentan un centro quiral, excepto la glicina.



Imágenes especulares de aminoácidos.

Todos los carbonos unidos a 4 radicales distintos presentan un centro quiral.