

Formulació Química Orgànica:

Els compostos orgànics, a diferència dels compostos inorgànics que estan formats per molècules senzilles, estan formats per molècules molt complexes.

La complexitat dels compostos orgànics resideix en la grandària de les seves molècules. Mentre que els compostos inorgànics estan formats per molècules amb pocs àtoms els compostos orgànics estan formats per molècules amb un número molt gran d'àtoms.

Com a exemple podem citar el ferrocianur de ferro (III) $\text{Fe}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]_3$ una de les molècules més complexes en química inorgànica, amb fórmula empírica $\text{Fe}_7\text{C}_{18}\text{N}_{18}$, que representa un total de 43 àtoms. Comparat amb l'àcid etilendiaminotetraacètic, amb fórmula molecular $\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{N}_2\text{O}_8$, que representa un total de 36 àtoms, resulta força senzilla.

Hexaciano ferrat (II) (Ió ferrocianur)	Àcid Etilen Diamino Tetraacètic (EDTA)

Afortunadament, malgrat la seva complexitat, la química orgànica està força estructurada donat que els compostos orgànics estan formats per un conjunt reduït d'elements.

La major part de compostos orgànics estan formats per quatre elements principals: C,H,O i N que són els que formen els grups funcionals més importants. En més petita proporció es troben el S i el P que formen grups funcional més secundaris. Finalment trobem en petites quantitats àtoms metàl·lics que formen compostos amb substàncies orgàniques per la seva capacitat de coordinació.

Complex Calci - EDTA	Complex porfirina - Ferro (Grup Hemo)

Per tant a la química orgànica ens trobem amb quatre nivells de complexitat a la molècula:

- La composició de la molècula.
- La grandària de la molècula.
- La conformació de la cadena d'àtoms de Carboni.
- L'estructura tridimensional de la cadena d'àtoms de carboni.

A cada nivell de complexitat que ens trobem hi ha una resposta des del punt de vista de la formulació.

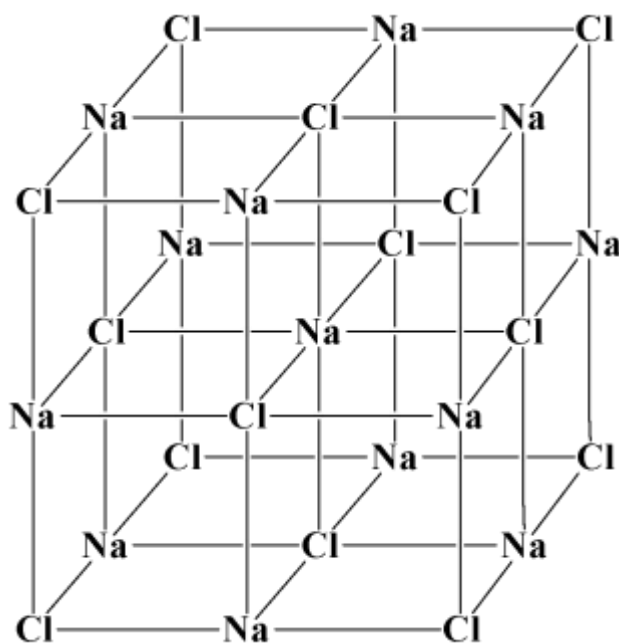
La composició de la molècula. Fórmula empírica.

La fórmula empírica d'un compost només ens indica les proporcions en que trobem els diferents elements dintre del compost. Per tant la informació que dona és limitada. Per exemple tots els glúcids tenen la mateixa fórmula empírica: CH_2O , raó per la qual en un principi se'ls va anomenar hidrats de carboni, però és evident que des del punt de vista químic no tots els glúcids tenen les mateixes propietats físiques, químiques ni organolèptiques. Per tant la fórmula empírica a la química orgànica només ens informa de la família de compostos a què pertany un compost determinat, sense que ens doni cap més informació sobre la seva estructura, ni sobre les seves propietats químiques.

Glucosa	Fructosa
$ \begin{array}{c} \text{CHO} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{HO}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{CH}_2\text{OH} \end{array} $	$ \begin{array}{c} \text{CH}_2\text{OH} \\ \\ \text{C}=\text{O} \\ \\ \text{HO}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{CH}_2\text{OH} \end{array} $
La glucosa i la fructosa són sucres amb propietats físiques, químiques i organolèptiques molt diferents, malgrat tot tenen la mateixa fórmula empírica CH_2O i fins i tot la mateixa fórmula molecular $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$. Les diferències que s'observen radiquen a la diferent posició del grup: $ \begin{array}{c} \text{R} \\ \diagdown \\ \text{C}=\text{O} \\ \diagup \\ \text{R}' \end{array} $ Que es troben al final de la cadena en el cas de la glucosa, i enmig de la cadena en el cas de la fructosa.	

Aquesta diferència entre la química orgànica i inorgànica és deguda a què a diferència de les substàncies orgàniques a la major part de les substàncies inorgàniques no existeixen les molècules pròpiament, sinó que sovint el que ens trobem és un empaquetament de ions, formant una estructura cristal·lina virtualment infinita i repetitiva. Des d'aquest punt de vista el què és determinant en quant a les propietats químiques d'un compost inorgànic és la seva composició i no la seva estructura.

Estructura d'un cristall de Clorur Sòdic



Com veiem en aquesta estructura tots els àtoms de Na i tots els àtoms de Cl ocupen posicions equivalents, per tant no es veurà cap diferència de comportament químic degut a la posició dels àtoms. Només serà possible observar alguna diferència substituint alguns dels àtoms que la formen per àtoms d'altre element, per tant canviant la composició de l'estructura.

La grandària de la Molècula. Fórmula Molecular.

Donat que la composició de la molècula no proporciona tota la informació necessària per explicar el comportament químic d'una substància es va plantejar la fórmula molecular. Aquesta no només ens indica la composició de cada molècula, sinó també el nombre d'àtoms que conté de cada element.

De la fórmula molecular es pot treure més informació sobre la molècula que de la fórmula empírica. La informació que traurem de la fórmula molecular serà:

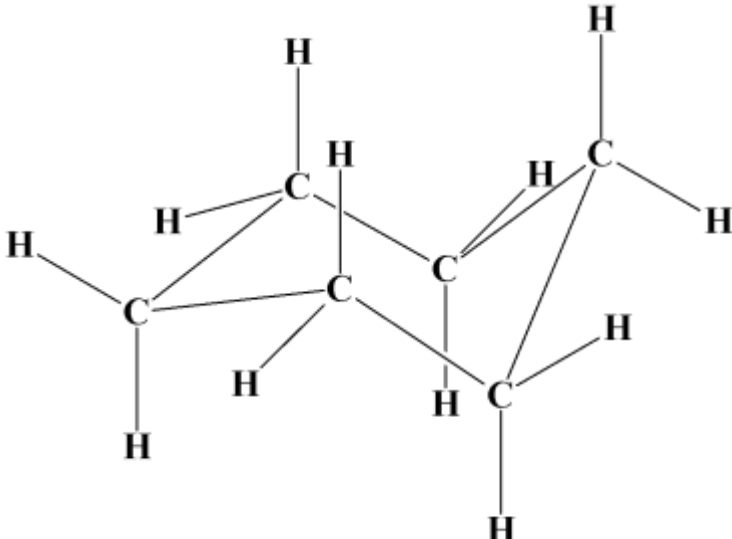
- a) La massa molecular.
- b) L'índex d'insaturació.

La massa molecular és força evident que es pot extreure de la fórmula molecular, donat que ens dona el nombre exacte de cada element que es troba a la substància. En canvi l'índex d'insaturació és un concepte nou que val la pena explicar.

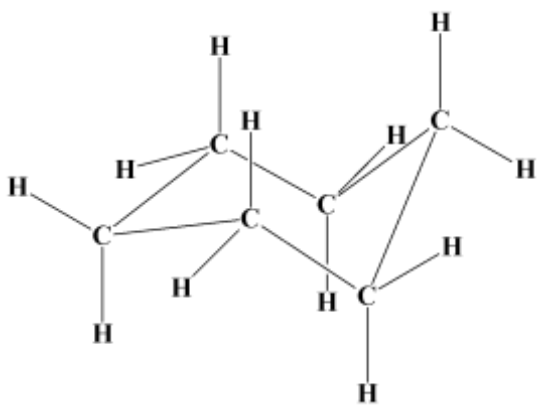
L'àtom de carboni és capaç de formar enllaços amb quatre àtoms diferents, per tant dintre d'una cadena d'àtoms de carboni cada un d'ells és capaç de formar dos enllaços amb dos àtoms de carboni adjacents, la qual cosa fa que quedin dues posicions per enllaçar amb àtoms d'hidrogen. Els àtoms finals de la cadena, com que no tenen més que un àtom de carboni adjacent tenen tres posicions lliures.

Butà	
Fórmula desenvolupada	Fórmula Molecular
$\begin{array}{ccccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & & \\ & & & & & & \\ \text{H} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{H} & \\ & & & & & & \\ & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & & \end{array}$	C_4H_{10}
La molècula de butà té totes les posicions de coordinació del carboni ocupades, unes per un altre àtom de carboni i les posicions restants per àtoms d'hidrogen. D'una estructura d'aquestes característiques es diu que està saturada, no pot contenir més hidrogen.	

Però si ens trobem amb substàncies amb enllaços múltiples o molècules cícliques on no hi ha final de cadena hi haurà un dèficit d'hidrogen a la molècula.

Fórmula desenvolupada	Fórmula Molecular	Dèficit d'hidrogen (àtoms)
$ \begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array} $	C_2H_6	0
$ \begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{C}=\text{C} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array} $	C_2H_4	2
$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	C_2H_2	4
$ \begin{array}{cccccc} \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & & & \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ & & & & & \\ \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array} $	C_6H_{14}	0
	C_6H_{12}	2

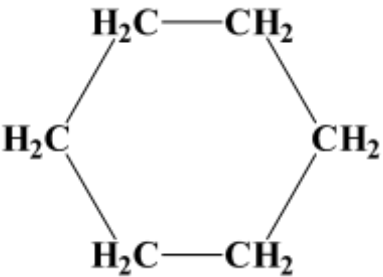
D'aquest dèficit d'hidrogen se'n diu insaturació. El nombre d'insaturacions d'un compost és el nombre d'àtoms d'hidrogen que falten entre 2, donat que cada vegada que apareix una insaturació es perden dos àtoms d'hidrogen.

Fórmula desenvolupada	Fórmula Molecular	Dèficit d'hidrogen (àtoms)	Insaturacions
$ \begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array} $	C_2H_6	0	0
$ \begin{array}{c} \text{H} \quad \quad \text{H} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{C}=\text{C} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{H} \quad \quad \text{H} \end{array} $	C_2H_4	2	1
$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	C_2H_2	4	2
$ \begin{array}{cccccc} \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & & & \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ & & & & & \\ \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array} $	C_6H_{14}	0	0
	C_6H_{12}	2	1

Les insaturacions són importants per a determinar l'estructura d'un compost a partir de la fórmula molecular, encara que no és suficient, donat que per a una mateixa fórmula molecular podem trobar més d'una cadena possible.

Conformació de la cadena d'àtoms de Carboni. Fórmula Semidesenvolupada.

Per poder justificar el comportament químic d'una substància hem de determinar l'estructura de la cadena d'àtoms de carboni, per tant hem d'utilitzar una fórmula que ens indiqui els enllaços existents entre els àtoms de carboni, aquesta és la fórmula semidesenvolupada. En aquesta fórmula només s'indiquen els àtoms de carboni de la molècula, amb els enllaços que els relacionen, com que la resta de posicions d'enllaç de cada àtom de carboni estan ocupades per àtoms d'hidrogen només s'indica el número que hi ha amb un subíndex.

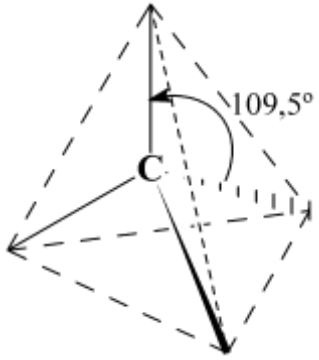
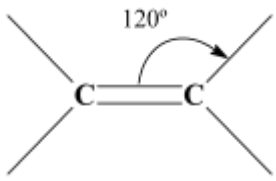
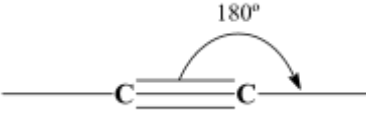
Fórmula Semidesenvolupada	Substància
$\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3$	Butà.
$\text{CH}_2=\text{CH}_2$	Etilè
$\text{CH}\equiv\text{CH}$	Acetilè
	Ciclohexà

Aquesta és la fórmula amb que ens trobem més sovint en química orgànica i bioquímica. Amb aquesta fórmula podem representar l'estructura de l'esquelet de carboni de la molècula si els àtoms de carboni presenten enllaços simple, dobles o triples i quants d'ells hi ha, també podem representar si és una cadena lineal, ramificada o cíclica.

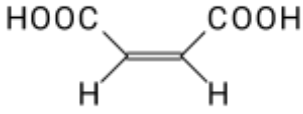
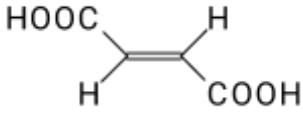
Estructura tridimensional de la cadena d'àtoms de Carboni. Fórmula Desenvolupada.

Les propietats químiques d'una substància depenen en última instància de l'estructura de la molècula, de com es distribueixen els àtoms a l'espai. Aquesta informació és la que ens dona la fórmula desenvolupada. En aquesta fórmula es representen la totalitat dels àtoms i enllaços de la molècula, i la seva distribució aproximada a l'espai.

Per interpretar correctament una fórmula desenvolupada hem de tenir en compte l'estructura tridimensional dels diferents tipus d'enllaços del carboni.

Enllaç Simple	Enllaç Doble	Enllaç Triple
		
Estructura Tetraèdrica	Estructura Trigonal Plana	Estructura lineal

La fórmula desenvolupada s'utilitza per distingir entre substàncies que només es distingeixen entre elles per l'estructura tridimensional de la molècula, com ara el compostos amb dobles enllaços, que poden presentar isomeria geomètrica o els glúcids i els aminoàcids, que presenten isomeria òptica (estereoisomeria).

Isomeria geomètrica	
Àcid maleic	Àcid fumàric
	
Àcid cis-butenodioic	Àcid trans-butenodioic

Isomeria.

La isomeria és la propietat que tenen certs compostos que tenen la mateixa composició i massa molecular, però diferent estructura. Dos substàncies isomeres entre si tenen per tant la mateixa fórmula molecular però les seves propietats químiques són diferents perquè els àtoms es distribueixen de manera diferent a l'espai. Aquestes diferències de distribució fan que tinguin diferent punts de fusió i d'ebullició, donat que les molècules no s'empaqueten de la mateixa manera al sòlid o líquid; però també poden tenir diferents constants d'acidesa, diferents potencials de reducció, perquè la diferent disposició dels àtoms a l'espai pot canviar les interaccions que té cada àtom amb el seu entorn químic.

Tenim quatre tipus d'isomeria:

- a) Isomeria de cadena.
- b) Isomeria geomètrica.
- c) Isomeria de funció.
- d) Isomeria òptica o estereoisomeria.

Isomeria de cadena. Ramificacions.

El tipus d'isomeria més senzill que ens podem trobar és la isomeria de cadena. A una mateixa fórmula molecular li poden correspondre més d'una cadena d'àtoms de carboni. Evidentment quan més àtoms de carboni tingui una cadena més isòmers de cadena li correspondran. Així trobem a la sèrie dels alcans:

Fórmula semidesenvolupada	Fórmula Molecular	Nom vulgar	Nom sistemàtic
CH_4	CH_4	metà	metà
$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$	C_2H_6	età	età
$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$	C_3H_8	propà	propà
$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$	C_4H_{10}	n-butà	butà
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{CH}-\text{CH}_3 \end{array}$	C_4H_{10}	isobutà	2-metil-propà
Com veiem els tres primers compostos de la sèrie no presenten isòmers perquè l'esquelet de carboni de la molècula és tan petit que no hi ha cap possibilitat de variació.			

Fórmula semidesenvolupada	Fórmula Molecular	Nom vulgar	Nom sistemàtic
$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$	C_5H_{12}	n-pentà	pentà
$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	C_5H_{12}	isopentà	2-metil-butà
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	C_5H_{12}	neopentà	2,2-dimetil-propà
$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$	C_6H_{14}	n-hexà	hexà
$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	C_6H_{14}		2-metil-pentà
$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	C_6H_{14}		3-metil-pentà
$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{CH}-\text{CH}-\text{CH}_3 \\ \quad \\ \text{CH}_3 \quad \text{CH}_3 \end{array}$	C_6H_{14}		2,3-dimetil-butà
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	C_6H_{14}		2,2-dimetil-butà
En canvi a mesura que augmenta el nombre d'àtoms de carboni augmenten les possibilitats de combinació i el nombre d'isòmers augmenta de forma exponencial, el pentà ja en té 3 isòmers i l'hexà ja en té 5.			

Isomeria de funció. Aldehids i cetones.

En algunes cadenes carbonades només si es mou un grup funcional poden canviar radicalment les seves propietats químiques, sense que canviï la seva fórmula funcional. El cas més cridaner és el dels aldehids i cetones, on només la posició del grup carbonil ($C=O$) fa que tinguem grups funcionals diferents. Si es troba a l'extrem de la cadena parlarem d'un aldehid, si es troba al mig de la molècula parlarem d'una cetona. Així ens trobem que des d'aquest punt de vista els glúcids pertanyen a una o altra funció, n'hi ha que són aldehids (aldoses) i n'hi ha que són cetones (cetoses).

Aldehids	Cetones	Fórmula Molecular
Aldehid Glicèric	Dihidroxiacetona	C ₃ H ₆ O ₃
CHO H — C — OH CH₂OH	CH₂OH C CH₂OH	
2,3 R-hidroxipropanal	2,3 hidroxipropanona	
Propanaldehid	Acetona	C ₃ H ₆ O
CHO CH₂ CH₃	CH₃ C CH₃	
Propanal	Propanona	

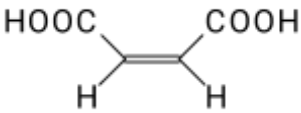
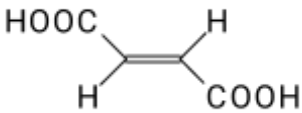
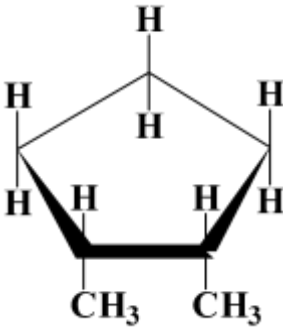
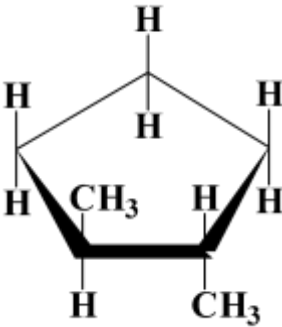
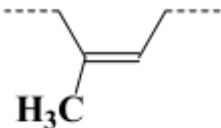
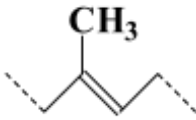
També es pot veure aquest tipus d'isomeria en alcohols i èters i a àcids carboxílics i èsters.

Alcohols	Èters	Fórmula Molecular
Alcohol n-propílic	Etil Metil éter	C ₃ H ₈ O
CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -OH	CH ₃ -CH ₂ -O-CH ₃	
n-propanol	Metoxietà	
Àcids Carboxílics	Èsters	
Àcid butíric	Acetat d'etil	C ₄ H ₈ O ₂
H ₃ C-CH ₂ -CH ₂ -COOH	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_3 \end{array}$	
Àcid butanoic	Etanoat d'etil	

Isomeria geomètrica. Rigidesa de les molècules.

Aquesta isomeria es dóna a les molècules que porten dobles enllaços i a les molècules cícliques.

Tant en un cas com altre ens trobem que els enllaços no poden girar lliurement sinó que els radicals que s'hi troben al voltant es troben fixos a la seva posició. Per tant ens podem trobar que els substituents es situïn a una mateixa banda o a bandes diferents.

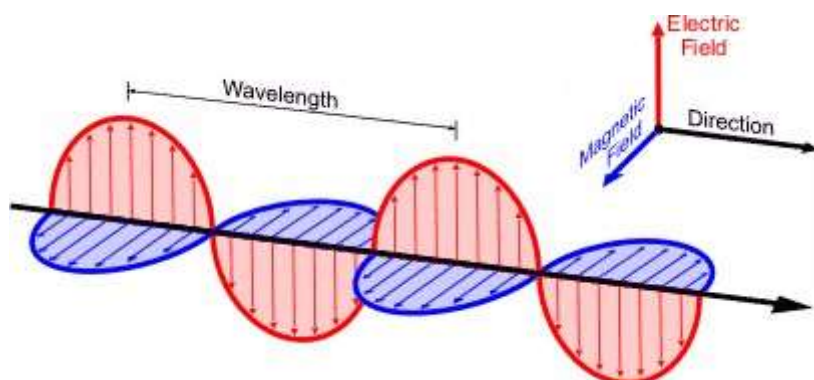
Àcid maleic	Àcid fumàric
	
Àcid cis-butendioic	Àcid trans-butendioic
	
Cis-1,2 dimetilciclobutà	Trans-1,2 dimetilciclobutà
	
Poli-cis-isoprè	Poli-trans-isoprè

Isomeria òptica. Estereoisomeria.

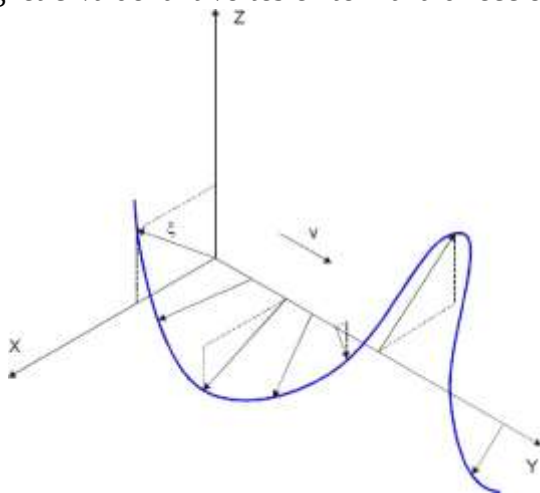
El darrer tipus d'isomeria que estudiarem és la isomeria òptica o estereoisomeria. Aquesta isomeria està produïda per una manca de simetria a la molècula que fa que giri l'angle de polarització de la llum.

Llum polaritzada:

La llum és una ona electromagnètica transversal. Això vol dir que ens trobem un camp elèctric i magnètic que oscil·len en dos plans perpendiculars entre ells i que les oscil·lacions d'ambdós són perpendiculars a la direcció de propagació de l'ona.



Normalment no ens adonem d'aquesta característica de les ones electromagnètiques perquè el pla en que vibra cada feix és aleatori, de manera que trobem que l'ona resultant té polarització cilíndrica, de forma que el pla en el que vibra el camp elèctric i magnètic va donant voltes en torn a la direcció de desplaçament.



Però podem seleccionar un pla de vibració o altre emprant filtres polaroides, la llum resultant es diu llum polaritzada.

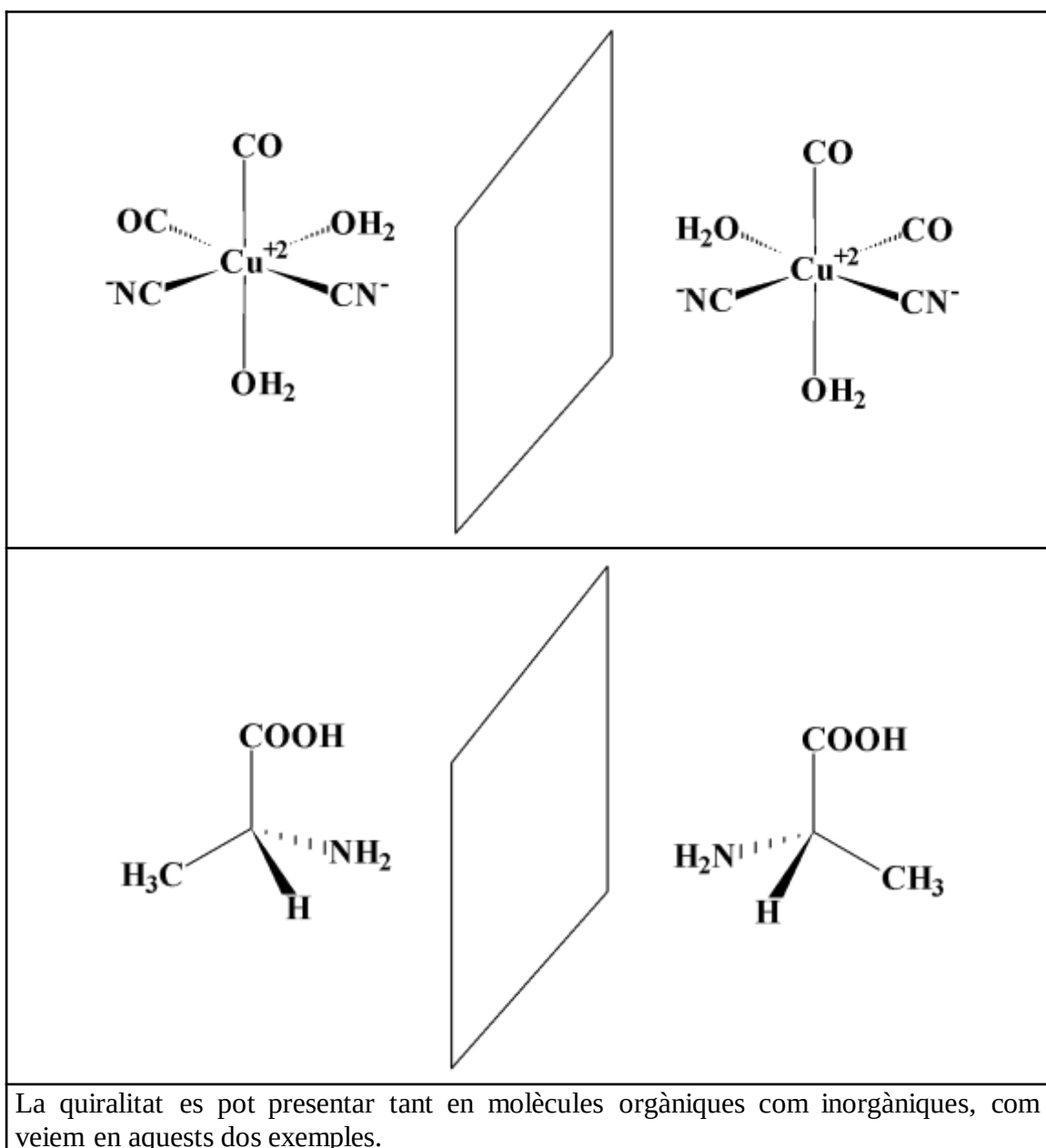
Els filtres polaroides actuen com una reixeta que només deixa passar la llum que vibra en el pla paral·lel a les esclatxes.

Regulant la orientació d'aquestes esclatxes podem seleccionar el pla de polarització de la llum.

Activitat òptica:

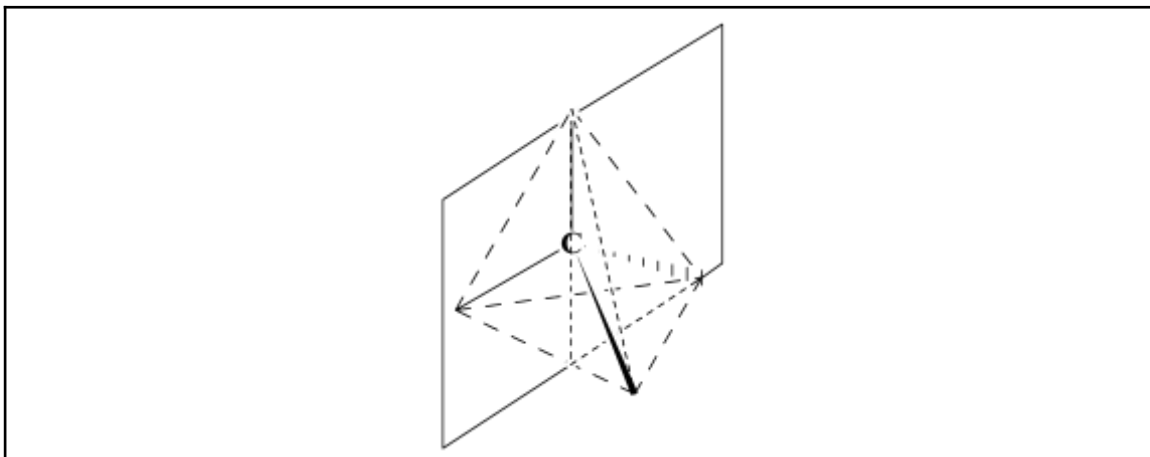
Amb els sucres es va trobar que quan es feia incidir llum polaritzada sobre una dissolució que contenia algun sucre es girava el pla de polarització de la llum. Aquest angle es podia mesurar interposant dos filtres polaroides, un abans d'entrar a la mostra i un altre després. Si la dissolució no és òpticament activa (per exemple aigua), els filtres polaroides transmeten la llum quan estan perfectament alineats (la qual cosa es pot emprar per calibrar l'aparell de mesura) si la dissolució és òpticament activa els filtres s'hauran de girar un cert angle perquè transmetin la llum.

L'activitat òptica succeeix per una manca de simetria a la molècula. Si ens trobem amb una substància que no té cap pla de simetria ens trobem que poden haver-hi dues formes de la molècula, una imatge especular de l'altra, d'aquesta propietat se'n diu quiralitat perquè les mans també són una imatge especular de l'altra.

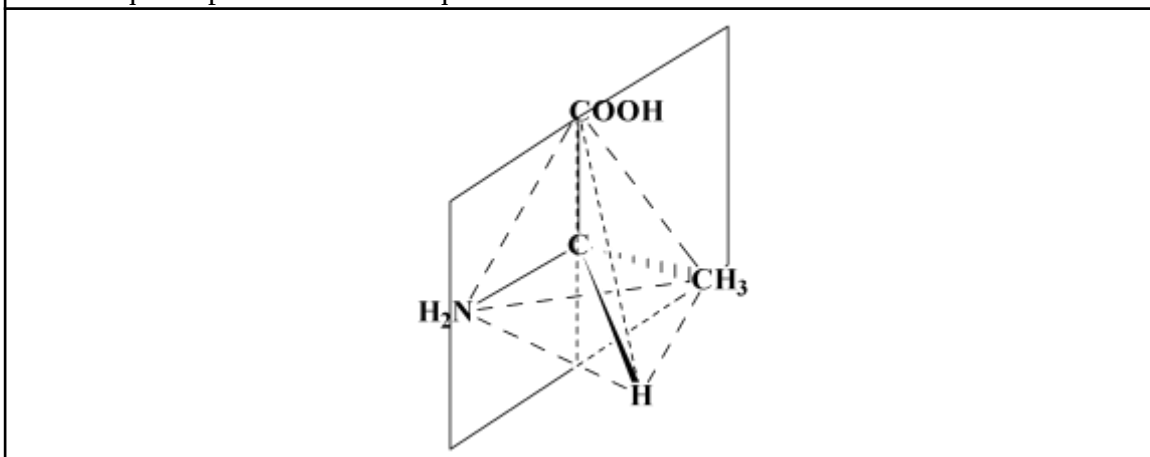


En el cas de les molècules orgàniques ens trobem que només els carbonis saturats, que tenen estructura tetraèdrica, amb quatre substituents diferents, carbonis asimètrics, poden tenir quiralitat.

Com que tant els carbonis amb un doble enllaç (que tenen estructura plana) com els que tenen un triple enllaç (que tenen estructura lineal) tenen plans de simetria a la seva molècula no poden tenir quiralitat, la única possibilitat és que la tinguin els carbonis saturats, amb estructura tetraèdrica. Però com que un tetraedre té quatre plans de simetria, que passa pel mig d'una cara i el costat que es troba davant, per trencar aquest pla de simetria és necessari que hagi un substituent diferent a cada vèrtex.

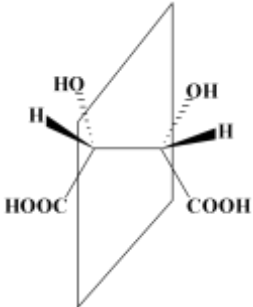
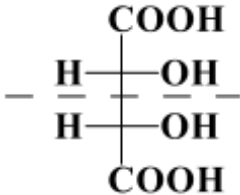


Un dels quatre plans de simetria que té un carboni tetraèdric.



Si trencuem la simetria amb quatre substituents diferents llavors desapareix el pla de simetria. La quiralitat és possible.

Malgrat tot podem trobar que encara que una molècula tingui carbonis asimètrics, l'estructura tingui algun pla de simetria i llavors no té activitat òptica. Això és el que ens trobem en el cas de l'àcid tartàric.

Projecció en cuny	Projecció de Fisher
	
Àcid R,S dihidroxibutandioic	
La presència del pla de simetria a l'eix entre els dos àtoms de carboni asimètrics impedeix que la molècula tingui quiralitat i per tant no té activitat òptica, d'això se'n diu mesòmer.	

Isomeria òptica o estereoisomeria	
Monosacàrids	
D-gliceraldehid	L-gliceraldehid
Projecció de Fisher	
$\begin{array}{c} \text{CHO} \\ \\ \text{H} - \text{C} - \text{OH} \\ \\ \text{CH}_2\text{OH} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CHO} \\ \\ \text{HO} - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{CH}_2\text{OH} \end{array}$
Representació en cuny	
$\begin{array}{c} \text{CHO} \\ \\ \text{HOH}_2\text{C} - \text{C} - \text{OH} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CHO} \\ \\ \text{HOH}_2\text{C} - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{OH} \end{array}$
2,3 R-hidroxipropanal	2,3 S-hidroxipropanal
Aminoàcids	
D-Alanina	L-Alanina
Projecció de Fisher	
$\begin{array}{c} \text{COOH} \\ \\ \text{H} - \text{C} - \text{NH}_2 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{COOH} \\ \\ \text{H}_2\text{N} - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$
Representació en cuny	
$\begin{array}{c} \text{COOH} \\ \\ \text{H}_3\text{C} - \text{C} - \text{NH}_2 \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{COOH} \\ \\ \text{H}_3\text{C} - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{NH}_2 \end{array}$
Àcid R-aminopropiònic	Àcid S-aminopropiònic
Quan passem de la projecció de Fisher a la representació en cuny els àtoms que es troben a la vertical es troben per sota del pla del paper, mentre que els que es troben a la horitzontal s'aixequen per sobre del pla del paper.	