

Ministerio de Cultura y Educación Universidad Nacional de San Luis Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia Departamento: Quimica

(Programa del año 2008)

Area: Qca Organica

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
QUIMICA ORGANICA I	ING. EN ALIMENTOS	24/01	2	1c

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
CIFUENTE, DIEGO ALBERTO	Prof. Responsable	P.ADJ EXC	40 Hs
FERRARI, MONICA MARTA	Prof. Responsable	A.1RA SIM	10 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
6 Hs	Hs	Hs	3 Hs	6 Hs

Tipificación	Periodo
B - Teoria con prácticas de aula y laboratorio	1 Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
10/03/2008	20/06/2008	15	90

IV - Fundamentación

La Química Orgánica es la Química de los Compuestos del Carbono. Su continuo desarrollo ha impactado prácticamente en todos los aspectos de nuestra vida cotidiana. Uno de estos aspectos está relacionado con la Química de los Alimentos. En este primer Curso de Química Orgánica se impartirán los principios generales de los diversos grupos de compuestos orgánicos siguiendo el clásico esquema de grupos funcionales. A partir del estudio de la nomenclatura y de las propiedades fisicoquímicas de dichos grupos se establecerán conceptos generales que permitan decidir sobre el comportamiento químico de una molécula determinada. Asimismo,se abordará el estudio de los diferentes mecanismos de reacción buscando establecer esquemas de razonamiento lógico que permitan generalizar ciertos comportamientos moleculares.

V - Objetivos

- 1. Alcanzar un adecuado conocimiento de la relación estructura molecular de los compuestos orgánicos, así como de las propiedades fisicoquímicas que caracterizan a los mismos.
- 2. Adquirir un adecuado manejo de la nomenclatura de los compuestos orgánicos.
- 3. Lograr un amplio e integrado dominio de los principales mecanismos de reacción que operan en las moléculas orgánicas.
- 4. Integrar los conocimientos teóricos con la experimentación programada en el Laboratorio y la resolución de Problemas de Aula

VI - Contenidos

TEMA Nº 1.- ESTRUCTURA ELECTRONICA, ENLACES Y PROPIEDADES: Configuración electrónica. Revisión de las teorías del enlace químico. Repaso de Teoría de Orbitales Moleculares. Orbitales atómicos y moleculares:

enlaces y solapamiento, orbitales híbridos. Carga Formal. Hibridación tetraédrica (sp3). Hibridación trigonal (sp2). Hibridación digonal (sp). Estructura de las moléculas y propiedades físicas. Polaridad de los enlaces. Moléculas polares y no polares. Interacciones no enlazantes entre moléculas. Interacciones dipolo-dipolo. Interacciones de Van der Waals. Enlace puente hidrógeno. Teoría de la resonancia: postulados y condiciones. Efectos derivados de desplazamientos electrónicos: Efectos inductivo y de resonancia. Ácidos y Bases. Teorías de Bronsted-Lowry y de Lewis. Concepto de Nucleófilo y Electrófilo.

TEMA Nº 2.- MOLECULAS ORGANICAS Y SUS REACCIONES: Grupos funcionales. Hidrocarburos alifáticos y aromáticos. Grupos funcionales con enlaces simples: haluros de alquilos; alcoholes; éteres; tioles; aminas alifáticas. Grupos funcionales con enlaces múltiples: Grupo Carbonilo: aldehídos y cetonas; ácidos carboxílicos y derivados. Compuestos aromáticos. Derivados halogenados, nitrados y sulfonados. Fenoles. Aminas aromáticas; diazo- y azocompuestos. Distintas modalidades de ruptura y formación de enlaces covalentes. Equilibrios, cinética, mecanismos y perfiles de reacción: Sustituciones, Adiciones y Eliminaciones.

TEMA N° 3.- ALCANOS Y CICLOALCANOS: Estructura del metano. Series homólogas. Isomería. Análisis conformacional de etano y n-butano. Síntesis de alcanos y cicloalcanos. Fuentes naturales de alcanos. Petróleo. Reacciones. Halogenación fotoquímica. Reactividad de halógenos frente a metano, cambios de energía, mecanismo. Halogenación de alcanos superiores. Reactividad y selectividad, balance energético. Pirólisis de alcanos; combustión. Estructura de cicloalcanos, calores de formación, análisis conformacional, tensión de anillo, estabilidades relativas. Cicloalcanos sustituídos, isomería, análisis conformacional.

TEMA Nº 4.- ESTEREOISOMERIA: Isomería Distintos tipos. Isomería plana y estructural. Tipos de isomería plana: isómeros de cadena; de posición; de función. Estereoisomería. Isómeros cis- y trans-. Propiedades. Estereoisomería en compuestos cíclicos. Isomería óptica. Quiralidad. Poder rotatorio. Actividad óptica y enantiómeros. Regla de secuencias para especificar la configuración. Racematos. Compuestos con más de un centro quiral. Diastereómeros.

TEMA N° 5.- HALUROS DE ALQUILO. REACCIONES DE SUSTITUCION NUCLEOFILA ALIFATICA Y DE ELIMINACION Estructuras, propiedades, conformación. Métodos de obtención. SN2: mecanismo, cinética, estereoquímica; efecto de la naturaleza del sustrato, nucleófilo, grupo saliente y solvente. E2: mecanismo, cinética, efecto isotópico, competencia con SN2, regioselectividad, naturaleza de la base, estereoquímica. Reacciones de eliminación. SN1: mecanismo, cinética, estabilidad de intermedios, reordenamientos, efecto del solvente, estereoquímica. Competencia entre SN1 y E2. SNi. Velocidades relativas en la formación de ciclos. Eliminación de Hofmann: factores que determinan la regioselectividad. Carbaniones.

TEMA N° 6.- ALQUENOS: Estructura. Isomería, nomenclatura cis/trans y E/Z. Estabilidad. Preparación y síntesis: Cracking de alcanos, deshidratación de alcoholes, deshidrohalogenación; mecanismos. Reacciones de adición electrofílica de alquenos, evidencias del mecanismo, transposición de carbocationes. Adición de haluros de hidrógeno a olefinas: Regla de Markovnikov: Justificación. Adición de agua. Solvomercuración-demercuración. Formación de halohidrinas. Hidroboración-oxidación. Adición de halógenos, compromiso estereoquímico. Ozonólisis, epoxidación; apertura de anillos oxirano: regio y estereoselectividad. Alenos: Estructura, estereoquímica.

TEMA N° 7.- SISTEMAS CONJUGADOS Y ALQUINOS: Dienos conjugados: preparación, estructura y estabilidad. Adición- 1,2 y 1,4. Control cinético y termodinámico. Reacción de Diels-Alder, dienos y dienófilos; consideraciones estereoquímicas. Sistemas alílicos: cationes, aniones y radicales alílicos. Carbocationes y radicales bencílicos, estabilidad, reactividad. Adición de Michael: Mecanismo, aplicaciones. Alquinos: Estructura. Preparación y síntesis a partir de carburos metálicos, por reacciones de sustitución nucleófila, por reacciones de eliminación. Reacciones de alquinos: acidez, iones alquinuro como nucleófilos, condiciones de preparación. Reducción mediante catalizador de Lindlar y por metales en amoníaco líquido, mecanismo y estereoquímica. Adiciones electrófilicas: halogenación, hidroboración-oxidación.

TEMA N° 8.- BENCENO Y AROMATICIDAD: El benceno: estructura, modelo de Kekulé; propiedades asociadas al carácter aromático, resonancia. Descripción de benceno según Teoría de Orbitales Moleculares. Regla de Huckel: bases electrónicas. Iones aromáticos. Hidrocarburos aromáticos polinucleares, propiedades, reactividad comparativa. Introducción al estudio de los heterociclos aromáticos: piridina y pirrol.

TEMA N° 9.- SUSTITUCIONES AROMATICAS: Sustitución aromática electrófila: mecanismo general, nitración, sulfonación, halogenación, reacciones de alquilación y acilación de Friedel-Crafts. Factores que influyen en la velocidad y orientación. Utilidad sintética. Sustitución aromática nucleófila: mecanismos de adición-eliminación y eliminación-adición. Bencino. Factores que influyen en mecanismo y velocidad.

TEMA Nº 10.- ALCOHOLES, TIOLES, ETERES Y FENOLES. Estructura. Nomenclatura. Isomería. Propiedades de los alcoholes. Acidez y basicidad. Preparación de alcoholes: Hidratación de alquenos: hidroboración y oximercuración. Dioles. Obtención de alcoholes por reducción de compuestos carbonílicos: aldehídos, cetonas, ésteres, ácidos carboxílicos y reactivos de Grignard. Reacciones de los alcoholes: deshidratación, oxidación, conversión de haluros de alquilo y tosilatos. Tioles (mercaptanos). Estructura, obtención y propiedades. Éteres. Nomenclatura. Estructura y propiedades. Obtención y reacciones de los éteres. Fenoles. Estructura, propiedades físicas. Métodos de preparación y síntesis. Acidez. Reacciones de sustitución electrófila aromática. Derivados alquilados. Ácidos y esteres fenólicos. Quinonas. Benzoquinonas. Métodos de preparación y síntesis. Reacciones de óxido-reducción.

TEMA N° 11.- ALDEHIDOS Y CETONAS. ADICION A GRUPO CARBONILO Propiedades físicas y preparación de aldehídos y cetonas. Reacciones de adición nucleófila a grupo carbonilo (AdN): Mecanismo general, estereoquímica. Formación de acetales y cetales, adición nucleófila de reactivos organometálicos, adición de cianuro, reducción con hidruros metálicos, mecanismo, condiciones operativas. Reacción con aminas: formación de iminas y enaminas. Reacción de Wittig. Tautomería ceto-enólica. Enolización: iones enolatos, reacciones de condensación aldólica. Reacción de Cannizzaro. Oxidación de aldehídos y cetonas. Enolización: Iones enolato. Reacciones de condensación catalizadas por bases (reacciónes aldólicas simples e intramoleculares).

TEMA N° 12.- ACIDOS CARBOXILICOS Y DERIVADOS: Ácidos carboxílicos: estructura; acidez: factores determinantes; síntesis y reacciones. Esteres: estructura, mecanismos de esterificación a hidrólisis: reacciones. Amidas, halogenuros y anhídridos ácidos: estructura, síntesis, reacciones. Sustitución acil-nucleófila: mecanismo, factores que afectan el curso del mismo.

Programa de Examen

Bolilla 1: Tema 1: ESTRUCTURA ELECTRONICA, ENLACES Y PROPIEDADES.

Bolilla 2: Tema 2: MOLECULAS ORGANICAS Y SUS REACCIONES.

Bolilla 3: Tema 3: ALCANOS Y CICLOALCANOS.

Bolilla 4: Tema 4: ESTEREOISOMERIA.

Bolilla 5: Tema 5: HALUROS DE ALQUILO. REACCIONES DE SUSTITUCION NUCLEOFILA ALIFATICA Y

DE ELIMINACION.

Bolilla 6: Tema 6: ALQUENOS.

Bolilla 7: Tema 7: SISTEMAS CONJUGADOS Y ALQUINOS.

Bolilla 8: Tema 8: BENCENO Y AROMATICIDAD.

Bolilla 9: Tema 9: SUSTITUCIONES AROMATICAS.

Bolilla 10: Tema 10: ALCOHOLES, TIOLES, ETERES Y FENOLES.

Bolilla 11: Tema 11: ALDEHIDOS Y CETONAS, ADICION A GRUPO CARBONILO.

Bolilla 12: Tema 12: ACIDOS CARBOXILICOS Y DERIVADOS.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

TRABAJOS PRACTICOS DE AULA

- -Nomenclatura
- -Resolución de problemas

TRABAJOS PRACTICOS DE LABORATORIO

- -TPL Nº 1-Haluros de Alquilo. Obtención de Bromuro de Etilo. Propiedades y reacciones.
- -TPL Nº 2-Hidrocarburos. Obtención de acetileno. Propiedades y reacciones.
- -TPL Nº 3-Sustituciones Aromáticas. Obtención de p-nitroanilina.
- -TPL Nº 4-Aldehídos y cetonas. Propiedades y reacciones.
- -TPL Nº 5-Destilación de una muestra de vino y determinación de su contenido de alcohol etílico.
- -TPL Nº 6-Separación e identificación cromatográfica de ácido benzoico, ácido cítrico y ácido ascórbico de jugos de frutas comerciales.

VIII - Regimen de Aprobación

Para la aprobación de la asignatura es necesario aprobar el régimen de trabajos teórico-prácticos, de laboratorio y de un mínimo del 80% de asistencia a las clases de TP y laboratorio. También es necesario la aprobación de tres examinaciones parciales con su respectivo régimen de recuperaciones. Donde se complementarán las recuperaciones extraordinarias para los alumnos que trabajan y las que son madres.

IX - Bibliografía Básica

- [1] -Loudon M.G.; Organic Chemistry, Addison-Wesley Publishing Company.-
- [2] -Mc Murry J.; Organic Chemistry, 2da. Ed., Brooks Cole.-
- [3] -Solomons G.T.W.; Química Orgánica, Ed. Limusa.-
- [4] -Morrison y Boyd; Química Orgánica, Ed. Fondo Educativo Interamericano.-
- [5] -Streitwieser A. y Heathcock C.H.; Química Orgánica, 3er. Ed., Interamericana-Mc. Graw-Hill.-
- [6] -Allinger, Cava, De Jongh, Johnson, Level y Stevens; Química Orgánica, Tomos 1 y 2; Ed. Reverté.-
- [7] -Roberts, Stewart y Caserio, Química Orgánica; Ed. Fondo Educativo Interamericano.-

- [8] -Fieser y Fieser; Química Orgánica Superior, Tomos 1 y 2; Ed. Grijalbo.-
- [9] -Vollhardt, K.P.C. and Schore, N.E.; Química Orgánica. Ed. Omega S.A. 2da. edición.

X - Bibliografia Complementaria

- [1] -March; Advanced Organic Chemistry; Ed. Mc. Graw-Hill
- [2] -Eliel; Elementos de Estereoquímica; Ed. Limusa.
- [3] -Sykes P.; Mecanismos de Reacción en Química Orgánica; Ed. Reverté.-
- [4] -Greene, T. Protective groups in Organic Synthesis Wiley-Interscience. 1981.
- [5] -Warren, S. Organic Synthesis: The disconnection approach John Wiley & Sons. 1982.
- [6] -Carey, F.A. and Sundberg, R.J. Advanced Organic Chemistry Plenum Press. 1981.
- [7] -Pérez A. Ossorio; Mecanismos de las Reacciones Orgánicas, Tomos 1 y 2; Ed. Alhambra.-

XI - Resumen de Objetivos

(ver objetivos)

XII - Resumen del Programa

Estructura electrónica, enlaces y propiedades. Moléculas orgánicas y sus reacciones. Alcanos y Cicloalcanos. Estereoisomería. Haluros de alquilo. Reacciones de Sustitución Nucleófila Alifatica y Eliminación. Alquenos. Sistemas conjugados. Alquinos. Benceno y Aromaticidad. Sustituciones Aromáticas. Alcoholes. Tioles. Éteres y Fenoles. Aldehídos y cetonas. Ácidos carboxíicos y derivados.

XIII - Imprevistos