



PLAN DE ESTUDIOS 2002

ASIGNATURA: **QUÍMICA ORGÁNICA I**
CÓDIGO **U904**
ESPECIALIDAD/ES: **Ing. Química - Ing. en Materiales**

Contenidos Analíticos:

PARTE TEÓRICA

LA QUÍMICA ORGÁNICA

Importancia. Cómo debe encararse el estudio de la química orgánica. Relación entre industria química orgánica y otras industrias. Reseña histórica. Definición actual (excepciones). Carácter especial y singular del átomo de carbono: posibilidades casi sin límites de esqueletos carbonados. Concepto de productos naturales y sintéticos. Importancia de los productos sintéticos vs. naturales.

EL C y EL ENLACE COVALENTE.

Enlaces covalentes simples y múltiples. Fórmula molecular. Estructura. Concepto de isomería. Escritura de fórmulas estructurales. Teoría de Valencia o Teoría de Resonancia. Energía de resonancia: Definición, cálculo. Condiciones y reglas que permiten estimar las energías relativas de las formas contribuyentes al híbrido de resonancia. Utilidad y limitaciones de la aplicación de la teoría. Teoría moderna del enlace: CLOA - TOM. Concepto de hibridación. Hibridación del carbono.

CARACTERÍSTICAS DE LOS COMPUESTOS ORGANICOS.

Características generales. Diferencias con los compuestos inorgánicos.

RELACIÓN ENTRE ESTRUCTURA Y PROPIEDADES FÍSICAS.

Origen de las diferentes propiedades físicas. Interacciones intermoleculares. Punto de fusión, punto de ebullición y solubilidad. Relación con las fuerzas intermoleculares y el peso molecular.

CLASIFICACIÓN DE LOS COMPUESTOS ORGÁNICOS.

Diferentes criterios. Funciones químicas y grupos funcionales. Serie homóloga. Nomenclatura.

DETERMINACIÓN DE LA ESTRUCTURA DE COMPUESTOS ORGANICOS-ANÁLISIS ORGÁNICO.

Aislamiento, producto crudo, purificación, controlador de pureza, análisis elemental cualitativo y cuantitativo, caracterización, identificación. Composición porcentual, fórmulas empírica, mínima, molecular.

REACCIONES ORGÁNICAS.

Definición de reacción química. Características de las reacciones orgánicas y comparación con las inorgánicas.



TERMODINÁMICA Y CINÉTICA.

Equilibrio. Velocidad. Cantidades termodinámicas. Teoría de las colisiones. Perfil energético e introducción al concepto de mecanismo de reacción.

SISTEMA REACCIONANTE.

Componentes del sistema reaccionante: Reactivos: clasificación. Efectos estructurales sobre la reactividad. Solventes: Clasificación. Influencia en el curso de una reacción. Catalizadores: Clases. Importancia de la catálisis. Inhibidores, venenos, iniciadores. Condiciones experimentales.

CLASIFICACIÓN DE LAS REACCIONES ORGÁNICAS.

Diferentes criterios. Principales tipos de reacciones en química orgánica.

HIDROCARBUROS.

Definición. Clasificación. Fuentes naturales de obtención de hidrocarburos: hulla, gas natural y petróleo. Petróleo: ¿Qué es el oro negro? Usos. Evolución histórica del aprovechamiento del petróleo. Composición. Clasificación de los crudos. Búsqueda y exploración. Torre de perforación. Producción primaria. Recuperación mejorada de petróleo. Refinado del petróleo. Índice de octano, índice de cetano. Ingeniería del petróleo. Volumen de producción y reservas. Proyecciones. Alternativas.

ANÁLISIS CONFORMACIONAL EN ALCANOS Y CICLOALCANOS.

Trabajo con modelos moleculares.

HIDROCARBUROS ALIFÁTICOS SATURADOS-ALCANOS Y CICLOALCANOS.

Definición. Fórmula molecular y representación general. Estructura molecular. Trabajo con modelos moleculares. Nomenclatura. Propiedades físicas. Reactividad química: Baja reactividad. Reacciones de sustitución (halogenación, mecanismo de halogenación vía radicalaria, estabilidad relativa de radicales libres hidrocarbonados), combustión, oxidación parcial y pirólisis.

HIDROCARBUROS ALIFÁTICOS INSATURADOS

- ALQUENOS. Definición. Fórmula molecular y representación general. Estructura molecular: Trabajo con modelos moleculares. Nomenclatura. Hidrocarburos alifáticos con más de una insaturación. Propiedades físicas. Introducción a la estereoisomería (isomería geométrica). Reactividad química: reacciones de adición electrofílica (mecanismo de reacción). Estabilidad relativa y estructura electrónica de carbocationes. Regioespecificidad y regioselectividad. Adiciones electrofílicas a sistemas conjugados. Adición de radicales libres. (polietileno y polipropileno). Importancia del etileno como materia prima en la obtención de productos orgánicos industriales y en la economía. Oxidación de alquenos. Utilidades de la reacción. Combustión. Dimerización iónica de alquenos. Importancia de la dimerización del isobutileno en la química del petróleo. Presentación de síntesis de alquenos a través de reacciones de eliminación.

- ALQUINOS. Definición. Fórmula molecular y representación general. Estructura molecular: Trabajo con modelos moleculares. Nomenclatura. Propiedades físicas. Clasificación. Obtención de acetileno a partir de gas natural y de coque. Propiedades técnicas y usos del acetileno. Reactividad química: Oxidación de alquinos. Utilidad de la reacción. Combustión. Adición electrofílica de reactivos simétricos y asimétricos. Introducción a la tautomería ceto-enólica: hidratación de acetileno para producir



acetaldehído. Sustitución del H acetilénico en alquinos verdaderos.

HIDROCARBUROS AROMÁTICOS.

Definición. Representación general. Aromaticidad. Estructura electrónica de los arenos. Trabajo con modelos moleculares. Nomenclatura y términos industriales. Reactividad química: reacciones en el anillo aromático (SEA) y en la cadena lateral. El mecanismo de la SEA. Reactividad y orientación. Efectos estéricos. SNA. Los mecanismos de la SNA. Reactividad y orientación. Hidrocarburos policíclicos aromáticos. Arenos bencenoides. Síntesis de anillos aromáticos. Principales hidrocarburos aromáticos. Usos de los hidrocarburos aromáticos: benceno, etilbenceno, estireno, poliestireno, cumeno, fenol, acetona, nylon, colorantes, dodecibenceno (detergentes). Los hidrocarburos policíclicos y el cáncer.

ISOMERÍA DE COMPUESTOS ORGÁNICOS.

Composición, estructura, conformación, configuración. Trabajo con modelos moleculares. Átomo de carbono estereogénico. Molécula quiral y aquiral. Fórmulas de proyección de Fischer y fórmulas espaciales. Definición de isómeros. Isomería. Diferentes clases. Sistema R-S (configuración absoluta). Nomenclatura: cis-trans, sistema E-Z. Propiedades de diastereoisómeros y enantiómeros. Modificación racémica y su resolución. Importancia de la estereoquímica en las reacciones químicas.

INTRODUCCIÓN A LOS MÉTODOS FÍSICOS ESPECTROSCÓPICOS EN LA DETERMINACIÓN DE ESTRUCTURAS ORGÁNICAS.

Introducción. Aplicación en química orgánica. Ventajas. Diferentes técnicas espectroscópicas y su aplicación en la resolución de problemas estructurales. Principios de la espectroscopía de absorción. Cambios que puede producir en una molécula la absorción de energía radiante. Espectro. Espectros electrónicos: Ultravioleta (UV) y Visible (VIS). Espectros infrarrojos (IR). Espectroscopía de resonancia magnética nuclear: ^1H -RMN. Espectros de masas.

DERIVADOS HALOGENADOS ALIFÁTICOS Y AROMÁTICOS.

Representación general. Clasificación. Nomenclatura. Propiedades físicas. Toxicidad. Métodos de obtención. Reactividad química. Derivados halogenados alifáticos: deducción de la reactividad; sustitución nucleofílica sobre C-saturado- sp^3 ($\text{SN}1$ y $\text{SN}2$); eliminación (E: $\text{E}1$ (catiónico y aniónico), $\text{E}2$). Competencia entre SN y E. Factores que afectan las SN y E. Reacciones de nucleófilos comunes (con O, N, S, X y C). Derivados halogenados aromáticos: escasa reactividad de las reacciones de SN y E en sobre C- sp^2 (aromático). Ejemplos de SNA. Compuestos halogenados de importancia industrial.

COMPUESTOS ORGANOMETÁLICOS.

Definición. Reactivos de Grignard. Reactividad.

ALCOHOLES, FENOLES Y TIOLES

Formulación. Abundancia en la naturaleza. Nomenclatura. Clasificación de alcoholes. Propiedades físicas. Propiedades espectroscópicas. Reactividad química: Revisión de acidez y basicidad. Acidez de alcoholes, fenoles y tioles (comparación entre ellos y con otras familias de compuestos ya desarrolladas, efecto de sustituyentes). Basicidad de alcoholes y fenoles. Oxidación de alcoholes, fenoles y tioles. Antioxidante fenólicos



comerciales. Conversión de alcoholes en alquenos y en derivados halogenados: Mecanismos de reacción ambas reacciones. Conversión de alcoholes en ésteres de ácidos orgánicos e inorgánicos. Alcoholes polihidroxilados: etilenglicol, glicerina (nitroglicerina), sorbitol. Aplicaciones industriales de los glicoles. SEA en fenoles. Síntesis de tioles a partir de RX (SN sobre Csp³). Aspectos industriales de los alcoholes y fenoles. Polifenoles aspectos generales. Oxidación a quinonas. Polifenoles de interés industrial.

ÉTERES Y EPÓXIDOS.

Éteres: Fórmula general. Clasificación. Nomenclatura. Propiedades físicas (comparación con otras familias de compuestos orgánicos ya desarrolladas). Espectroscopía. Importancia de los éteres como disolventes. Producción comercial: ter-butil metiléter y éter etílico. Reacciones secundarias. Mecanismos de reacción. Ruptura del enlace C-O de los éteres. Epóxidos: oxiranos. Síntesis general de oxiranos. Preparación industrial de óxido de etileno. Reactividad química: apertura del anillo de oxirano. Mecanismo de reacción. Resinas epoxi.

COMPUESTOS CARBONÍLICOS ALIFÁTICOS Y AROMÁTICOS.

Formulación general. Nomenclatura. Propiedades físicas (comparación con otras familias de compuestos orgánicos ya desarrolladas). Espectroscopía. Estructura. Deducción de la reactividad química. Tautomería ceto-enólica. Reactividad química: oxidación y reducción, adición nucleofílica al carbono carbonílico (mecanismo de reacción en presencia de nucleófilos débiles y fuertes). Acidez de H-alfa al C=O. El anión enolato. Condensación aldólica. Halogenación y reacción halofórmica. Síntesis generales de aldehídos y cetonas. Aldehídos y cetonas en la naturaleza, los de mayor importancia industrial y sus aplicaciones.

PARTE PRÁCTICA

Clase de "Seguridad en el laboratorio". Seminario práctico "Nomenclatura de compuestos orgánicos". Seminario práctico "Sólidos" (separación, purificación, control de pureza, caracterización e identificación). Purificación de sólidos por "Recristalización". Control de Pureza, caracterización e identificación de sólidos por "Punto de Fusión". Purificación de sólidos por "Sublimación". Separación y purificación por "Extracción y lavado". Seminario práctico "Líquidos" (separación, purificación, control de pureza, caracterización e identificación). Separación y Purificación de líquidos por "Destilación simple y Destilación Fraccionada". Separación y aislamiento de líquidos por "Destilación por Arrastre con vapor de agua." Purificación de líquidos (como excepción de sólidos) "Destilación a presión reducida".

BIBLIOGRAFÍA GENERAL:

Parte Teórica:

- 1) "Química Orgánica". H. Hart y J. Hart. Editorial: Mc Graw Hill. 1995. Biblioteca DIQ, Biblioteca Central Fac. Cs. Exactas, ejemplar de la profesora.
- 2) "Química Orgánica". T.W.Graham y Solomon. Editorial: Limusa. 1979. Biblioteca DIQ, Biblioteca Central Fac. Cs. Exactas, ejemplar de la profesora.



- 3) "Química Orgánica". Morrison y Boyd. Editorial: Prentice Hall. Cuarta Edición, 1994 (ó similar). Biblioteca DIQ, Biblioteca Central Fac. Cs. Exactas, ejemplar de la profesora.
- 4) "Química Orgánica". J. Mc Murry. Editorial: Sudamericana. Tercera Edición, 1994 (ó similar). Biblioteca Central Fac. Cs. Exactas.
- 5) "Química Orgánica". A. Streitweiser y C.H. Heathcock.. Editorial: Sudamericana. Tercera Edición, 1988 (ó similar). Biblioteca Central Fac. Cs. Exactas, ejemplar pertenencia personal de la profesora.
- 6) "Química Orgánica Básica y Aplicada (de la molécula a la industria)". Eduardo Primo Yúfera. Tomos I y II. Editorial: Reverté. 1996. Biblioteca DIQ
- 7) "Química Orgánica". Francis A. Carey. Editorial: Mc Graw Hill. Tercera edición, 1999. Ejemplar pertenencia personal de la profesora.
- 8) "Química Orgánica". Mary A. Fox, James K. Whitesell. Editorial: Pearson Educación. Segunda edición, 2000. Ejemplar pertenencia personal de la profesora.

Parte Práctica:

- 1) "Técnicas de laboratorio de Química Orgánica". Wiberg. Biblioteca Central Fac. Cs. Exactas
- 2) "Curso Práctico de Química Orgánica". Brewster, Vanderwert y Mcven. Biblioteca Central Fac. Cs. Exactas y ejemplar personal de la profesora.
- 3) "Fundamentos teórico-prácticos del laboratorio". L. Galagovsky y Kurman. Biblioteca Central Fac. Cs. Exactas, en la cátedra.
- 4) "Determinación de estructuras Orgánicas". Pasto y Johson. Biblioteca Central Fac. Cs. Exactas
- 5) "Practical Organic Chemistry". Vogel. Biblioteca Central Fac. Cs. Exactas