



## 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:  $^1\text{H}$ -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- $\text{sp}^3$  ( $\text{SN}1$  y  $\text{SN}2$ ); eliminación (E:  $\text{E}1$  (catiónico y aniónico),  $\text{E}2$ ). Competencia entre  $\text{SN}$  y E. Factores que afectan las  $\text{SN}$  y E. Reacciones de nucleófilos comunes (con O, N, S, X y C). Derivados halogenados aromáticos: escasa reactividad de las reacciones de  $\text{SN}$  y E en sobre C- $\text{sp}^2$  (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 Csp<sup>3</sup>). 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