

PROGRAMA DE LA ASIGNATURA
QUÍMICA ORGÁNICA 1

SEM.	CÓDIGO	TEORÍA H/S	PRÁCT H/S	LAB. H/S	UNIDAD CRÉDITO	PRELACIÓN
4	41405	4	2	0	5	QUÍMICA 21

Antes de iniciar el curso de Química Orgánica 1, el estudiante deberá repasar los aspectos enunciados a continuación, los cuales forman parte de los programas de Química General (11 y 21) y que son fundamentales para la comprensión de esta asignatura.

CONOCIMIENTOS MÍNIMOS NECESARIOS

Estructura atómica del átomo (H, C, O, N). Radio atómico. Electronegatividad. Enlace químico: Iónico, covalente (Regla del octeto, valencia, carga formal) y dativo coordinado. Estructura molecular: longitud de enlace, ángulo de enlace (incluir como ejemplo las moléculas de agua, amoníaco y ácido nítrico). Energía de disociación de enlace. Enlace covalente polar. Relación entre estructura y el comportamiento químico. Atracciones moleculares.

Reacción química. Constante de equilibrio. Factores termodinámicos: energía libre, entalpía de reacción, energía de activación, estado de transición. Condiciones de reacción. Representación gráfica del cambio de energía en una reacción química. Velocidad de reacción.

Ácidos y bases según Lowry-Bronsted, ácidos y bases fuertes y débiles. Ácidos y bases según Lewis. (Bibliografía: #1, caps. 1 y 2. #2, cap. 1)

TEMA 1: INTRODUCCIÓN A LOS COMPUESTOS DEL CARBONO.

- 1.1. Átomo de carbono: carbono tetravalente (Hibridización sp^3 , sp^2 , sp).
- 1.2. Representación orbital molecular de metano, etano, eteno, acetileno, butadieno y benceno.
- 1.3. Otros átomos de interés: nitrógeno, oxígeno y halógenos. Representación orbital molecular de moléculas que muestren los diferentes tipos de hibridación para el N y el O (aminas, iminas, alcoholes, cetonas, etc).
- 1.4. Grupos funcionales: definición, clasificación, características físicas y nomenclatura IUPAC. Compuestos C-H, C-X, C-O, C-N, C-S, C-P. Compuestos heterocíclicos. (Bibliografía: #1, Caps. 2 y 3. #2, cap. 2)

TEMA 2 : ESTEREOQUIMICA.

- 2.1. Isomería estructural de: cadena, posición y función. Isomería espacial o estereoisomería. Isomería geométrica. Centros rígidos: dobles enlaces, anillos. Nomenclatura: cis-trans, Z y E.
- 2.2. Isomería óptica: actividad óptica. Polarímetro. Representaciones espaciales de las moléculas: de cuña, caballete, proyecciones de Fischer y Newman. Enantiometría. Configuraciones R y S. Quiralidad. Simetría molecular: elementos de simetría. Carbono quiral vs centro quiral. Compuestos con dos o más centros quirales. Enantiómeros vs diastereoisómeros. Compuestos D, L. Proquiralidad. Topismo: homotopía, enantiotopía y diastereotopía.
- 2.3. Centros quirales distintos del carbono. Resolución de mezclas racémicas. Isomería conformacional en compuestos acíclicos y cíclicos. Conformación vs configuración. Análisis conformacional, representación gráfica. (Bibliografía: #1, cap. 4. #2, cap. 4, #3, #4)

TEMA 3: ESPECTROSCOPIA.

- 3.1. Espectroscopía molecular. Espectro electromagnético. Características de un espectro. Espectroscopia IR: principios de correlación, absorciones características, enlace C-C y C-H (Aldehídos, cetonas, ácidos carboxílicos y derivados). Uso de la espectroscopia IR.
- 3.2. Espectroscopia RMN: origen del fenómeno, número de señales, desplazamientos químicos, acoplamiento spin-spin, constantes de acoplamiento, acoplamiento complejos, desacoplamiento. Interpretación y usos de la RMN-H.
- 3.3. RMN- C^{13} : Desplazamientos químicos. Acoplamiento spin-spin. Espectros acoplados y desacoplados. Interpretación y usos.
- 3.4. Espectroscopia UV: Absorción de energía y excitación electrónica. Compuestos modelos para el análisis espectral. Cálculos empíricos. Usos.
- 3.5. Espectrometría de masas: Interpretación, fragmentación y usos. (Bibliografía: #1, cap. 8 y 21, #5)

TEMA 4: RELACIÓN ESTRUCTURA - REACTIVIDAD MOLECULAR

- 4.1. Centro de reacción. Reactividad. Factores que afectan la reactividad. Efectos electrónicos: inductivos y resonantes (conjugación e hiperconjugación). Aromaticidad. Efectos estéricos.
- 4.2. Reacción ácido-base: revisión de conceptos (ácido, base, constante de acidez y basicidad, ejemplos). Factores que afectan la basicidad y la acidez de los compuestos orgánicos (en forma ilustrativa y con numerosos ejemplos). Electronegatividad, Hibridación, solvatación, efectos inductivos, resonantes y estéricos de los sustituyentes.
- 4.3. Mecanismo de reacción: concertado (1 etapa) y complejo (2 ó más etapas). Intermediarios de reacción (estructura y estabilidad en función de los efectos electrónicos y estéricos). Radicales libres, carbocationes, carbenos y carbaniones.
- 4.4. Clasificación de las reacciones de acuerdo al:
 - a) Tipo de ruptura de enlace: homolítica y heterolítica (repasso).
 - b) Calor absorbido o desprendido: endotérmica y exotérmica (repasso).
 - c) Reactivo atacante: nucleófilo o electrófilo.
 - d) Cambio que sufre el sustrato: sustitución, eliminación, adición y rearreglo.
 - e) Cambio del estado de oxidación: oxidación-reducción (repasso).(Bibliografía: #1, #2, cap.5, #4, cap.6)

TEMA 5: SUSTITUCIONES ALIFATICAS.

- 5.1. Sustituciones vía radicales libres: reacción general, mecanismo. Halogenación de alcanos. Evidencias. Brominación alílica.
- 5.2. Sustitución nucleofílica sobre carbono saturado: mecanismo de reacción (SN1, SN2). Estereoquímica. Variables de la sustitución nucleofílica (grupo saliente, nucleófilo, lugar de sustitución, efectos del disolvente, SN1 frente a SN2). Reacciones competitivas. Transposiciones estructurales: transposiciones de carbocationes, transposiciones alílicas, transposición pinacólica).
- 5.3. Sustituciones en sistemas cíclicos. Otros mecanismos: SNi, SN1', SN2', SNi'. Participación de grupos vecinos.
- 5.4. Halogenuros como nucleófilos: halogenoalcanos. Oxígeno y azufre como nucleófilos: alcoholes, éteres, tioles y sulfuros. Nitrógeno y fósforo como nucleófilos: aminas y fosfinas. Carbono como nucleófilo: extensión de la cadena carbonada. Hidruro como nucleófilo: reducción a hidrocarburos. (Bibliografía: #1, cap.6. #6, cap.10. #4, caps 9 y 18).

BIBLIOGRAFÍA

1. R. Fessenden and J. Fessenden. Organic Chemistry
2. D. Marcano y L. Cortés. Química Orgánica
3. Eliel. Estereoquímica
4. Pine, Hendrickson, Cram, Hammond. Química Orgánica
- 5.- Silverstein. Spectrometric Identification of Organic Compounds.
6. March J. Advanced Organic Chemistry
7. Morrison y Boyd. Química Orgánica.