

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA ORGÁNICA

480.  
1981

ASIGNATURA: QUÍMICA ORGÁNICA I . . . . .  
LIC. en CIENCIAS  
CARRERA: QUÍMICAS . . . . . PLAN: Vigente . . . . .  
CARACTER: OBLIGATORIA . . . . . (Indicar si es obligatoria u optativa)  
DURACION DE LA MATERIA: . cuatrim. (Indicar si es semestral o anual)  
HORAS DE CLASE: a) Teóricas .4. . hs. b) Prácticas . 13. hs. c) Totales . 17. hs.  
ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Química General e Inorgánica II . . . . .

PROGRAMA

- 1 - Introducción  
Química Orgánica: definición. Panorama histórico y actual. Métodos de separación, purificación y caracterización de las sustancias orgánicas. - Fórmula mínima y molécula. Estructura, isómeros estructurales.
- 2 - Uniones químicas.  
El átomo de hidrógeno: funciones de onda, orbitales, números cuánticos. Átomos polielectrónicos. El átomo de carbono. Hibridación. Orbitales moleculares. Las uniones carbono-carbono simple, doble y triple. Electronegatividad y dipolos. Energías de unión.
- 3 - Propiedades físicas y estructura.  
Interacciones intermoleculares: fuerzas de van der Waals, London, dipolo-dipolo, unión de hidrógeno. Correlaciones entre algunas propiedades físicas y estructura.
- 4 - Grupos funcionales.  
Hidrocarburos alifáticos: alcanos, alquenos, alquinos, Hidrocarburos alicíclicos. Hidrocarburos aromáticos. Derivados halogenados. Grupos funcionales que contienen oxígeno: alcoholes, fenoles, éteres, aldehidos, cetonas, ácidos, ésteres. Grupos funcionales que contienen nitrógeno: aminas, nitro compuestos, nitrilos, amidas. Compuestos heterocíclicos.
- 5 - Tipos de reacciones  
Clasificación: reacciones de sustitución, adición y eliminación. Reacciones homolíticas y heterolíticas. Intermediarios de reacción. Reactivos nucleofílicos y electrofílicos. Energías de reacción. Teoría del estado de transición. Diagramas de energía. Control cinético y termodinámico.
- 6 - Alcanos. Substitución homolítica  
Estructura. Nomenclatura. Grupos alquilo. Isomería de posición. Propiedades físicas. Métodos de síntesis: hidrogenación de alquenos; reacción de halogenuros de alquilo; reducción de cetonas; reacción de Wurtz; método de Kolbe. Reacciones: combustión, isomerización, cracking, deshidrogenación, halogenación, nitración. Reacciones de sustitución homolítica; estabilidad de los radicales libres.

Dr. EDUARDO G. GROS  
Director Dto. Química Orgánica

7 - Estereoquímica

Estereoisomería. Estructura, configuración, conformación, Análisis conformacional: rotación alrededor de uniones simples carbono-carbono; conformaciones de los alcanos. Diagramas de energía. Proyecciones de Neumann y fórmulas de caballete.

Isomería geométrica: rotación impedida alrededor de uniones dobles carbono-carbono. Nomenclatura, E-Z. Estabilidad relativa.

Isomería óptica: disimetría molecular. Alcanos, espiranos, difenilos, carbono asimétrico. Poder rotatorio. Sustancias con más de un carbono asimétrico. Diastereoisómeros; formas meso y formas eritro y treo. Modificaciones racémicas: racemización, epimerización; resolución. Configuración absoluta y relativa. Representación plana de configuración; convención de Fischer. Nomenclatura configuracional.

8 - Cicloalcanos

Estructura. Nomenclatura. Análisis conformacional. Tensión de los anillos: teoría de Baeyer; Métodos de obtención: ciclación de dehalogenuros; adición de carbenos. Reacciones de ciclopropano, ciclobutano y cicloalcanos mayores: hidrogenación, reacción con bromo e hidrácidos.

9 - Alquenos. Adición electrofílica y homolítica.

Estructura. Nomenclatura. Propiedades físicas. Métodos de preparación: deshidrohalogenación de halogenuros de alquilo, deshidratación de alcoholes, deshalogenación de dihalogenuros vecinales, reducción de alquilos. Reacciones de adición electrofílica trans: halogenación, hidrohalogenación, hidratación, formación de halohidrina, polimerización. Mecanismo; orientación, estereoquímica.

Adiciones cis: Hidroboración, epoxidación, oxidación con tetróxido de osmio y permanganato de potasio, adición de carbenos.

Reacciones de adición homolítica: adición de bromuro de hidrógeno, polimerización.

Hidrogenación catalítica. Cicloadiciones: reacción de Diels-Alder. Sustitución alílica

Dienos: Clasificación. Doble enlace conjugados: estabilización. Adición 1,2 y 1,4: control cinético y termodinámico.

10- Alquinos

Estructura. Nomenclatura. Propiedades físicas. Método de preparación: deshidrohalogenación de hidrocarburos vecinales y geminales; alquilación de alquinos terminales. Reacciones de adición: hidrogenación, halogenación, hidrohalogenación, hidratación, hidroboración. Carácter ácido, formación de sales. Transposición de la triple ligadura

11- Hidrocarburos aromáticos. Aromaticidad. Sustitución electrofílica aromática.

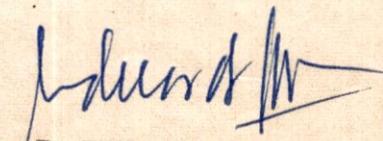
Benceno. El problema de su estructura. Fórmula de Kekulé. Estructura electrónica. Método de los orbitales moleculares y de la resonancia. Aromaticidad: regla de Hückel; ejemplos. Nomenclatura de los derivados del benceno.

Sustitución electrofílica aromática: nitración, halogenación, sulfonación, alquilación, acilación. Efectos de los sustituyentes: orientación, activación, desactivación.

Mecanismos. Derivados polisustituídos. Oxidación de cadenas laterales. Reducción de compuestos aromáticos.

Hidrocarburos aromáticos policíclicos. No condensados: bifenilo. Arilcanos: hexafenileno; disociación. Condensados: naftaleno, antraceno, fenantreno. Estructuras. Reacciones de sustitución electrofílica: reactividad de los distintos carbonos. Reducción, oxidación y adición.

12- Hidrocarburos de importancia industrial. Hidrocarburos en la naturaleza: gas natural, petróleo, esquistos bituminosos. Bases químicas de los métodos tecnológicos de producción de hidrocarburos a partir del petróleo y por destilación de la hulla. Hidrogenación del carbón y del óxido de carbono. Metano, etileno, propileno, butenos, acetileno, benceno, tolueno. Polímeros de hidrocarburos no saturados. Nociones de los principales procesos petroquímicos.



Dr. EDUARDO G. GROS  
Director Dto. Química Orgánica

13- Análisis estructural - Métodos espectroscópicos.

Determinación de estructuras de las sustancias orgánicas: principios; métodos clásicos modernos. Espectros ultravioleta y visible: niveles electrónicos, correlaciones. Espectros infrarrojos: vibraciones moleculares. Tables. Espectros de resonancia magnética nuclear. Desplazamientos químicos. Acoplamiento de spin. Espectros de masa: ion molecular, fragmentaciones. Determinación de estructuras mediante el empleo de los métodos espectroscópicos.

14- Derivados halogenados - Sustitución nucleofílica y reacciones de eliminación.

Halogenuros de alquilo. La unión carbono-halógeno. Propiedades físicas. Métodos de obtención: a partir de alcanos, alquenos, alcoholes, cetonas, alquinos. Obtención de loduros.-

Sustitución nucleofílica en carbono saturado: mecanismos  $S_N1$  y  $S_N2$ . Reactividad, estereoquímica. Reacciones competitivas.

Eliminación: mecanismos  $E1$  y  $E2$ . Reactividad, orientación; estereoquímica. Halógenos de arilo. Sustitución nucleofílica aromática. Mecanismo bimolecular, activación. Mecanismo eliminación-adición: bencenos. Reactividades relativas de halogenuros de alquilo vinilo, alilo, bencilo y arilo. Reducción de halogenuros. Compuestos organometálicos: reacciones de los compuestos organosódicos (Wurtz): obtención de difenilos. Compuesto organomagnésicos; reactivos de Grignard, preparación, estructura, importancia en síntesis.-

15- Alcoholes y fenoles. Reacciones de transposición.

Alcoholes. Estructura. Nomenclatura. Clasificación. Propiedades físicas: unión hidrógeno. Métodos de preparación: a partir de alquenos (adición de agua, hidrobromación), a partir de compuestos carbonílicos (reducción, adición de reactivos de Grignard), a partir de halogenuros de alquilo, de ácidos carboxílicos y ésteres, de epóxidos. Alcoholes de importancia industrial, metanol, etanol, propanoles, butanoles; métodos de producción. Reacciones. Propiedades ácidas y básicas. Formación de éteres, epóxidos, y ésteres. Oxidación. Conversión en halogenuros de alquilo. Deshidratación. Polialcoholes: 1,2 glicoles. Preparación. Ruptura oxidativa. Formación de derivados cíclicos. Etilenglicol, glicerina.

Reacciones de transposición, tipos principales, mecanismos, transposición pinacolónica, retropinacolónica.

Fenoles. Estructura electrónica. Propiedades físicas. Métodos de preparación: fusión a línea de ácidos sulfónicos. Hidrólisis de sales de diazonio. Métodos industriales. Reacciones químicas: acidez, esterificación, eterificación, oxidación, sustitución en el anillo, condensación con aldehídos: resinas fenólicas. Polifenoles: miembros más importantes.

16- Eteres y epóxidos

Eteres: estructura y propiedades físicas. Métodos de obtención: Síntesis de Williamson, deshidratación de alcoholes, metilaciones con diazometano. Reacciones: sales de oxonio, ruptura por ácidos, oxidación.

Epóxidos: métodos de obtención: deshidrohalogenación y oxidación de dobles ligaduras. Oxido de etileno. Reacciones: apertura catalizada por ácidos y bases. Reacción de Grignard. Otros éteres cíclicos.

BIBLIOGRAFIA

"Química Orgánica"; Morrison y Boyd, Fondo Educativo Interamericano, 1976.-

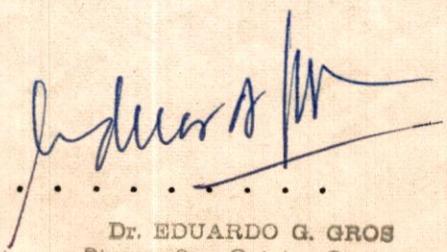
"Química Orgánica", Allinger y otros. Ed. Reverté, 1973. . .

"Organic Chemistry"; Hendrickson, Cram. Hammond, 3a. edición, Mc. Graw-Hill - Kogakusha, 1970.

"Química de los Compuestos Orgánicos", Noller, Ed. Médico-Quirúrgica, 1968.



Fecha . . . . .



Aprobado por Resolución 2A-429/81

Dr. EDUARDO G. GROS  
Director Dto. Química Orgánica