

PRONTUARIO

TÍTULO:	Química orgánica II
CODIFICACIÓN:	QUI 302
PRERREQUISITO:	QUI 301
CORREQUISITO:	QUI 302L
CRÉDITOS:	4 créditos 45 horas contacto 45 horas de laboratorio 1 término

DESCRIPCIÓN

Estudio de sistemas aromáticos, los mecanismos de sustitución electrofílica aromática, la adición nucleofílica al carbonilo, la sustitución nucleofílica acílica y las condensaciones relacionadas con enolatos. Se discute la nomenclatura IUPAC de los derivados de benceno, aldehídos, cetonas, los ácidos carboxílicos y sus derivados, y las aminas. Se presenta al final una introducción a la química de carbohidratos, lípidos, aminoácidos y ácidos nucleicos. Se discuten las técnicas espectroscópicas de ultravioleta-visible, infrarrojo, resonancia magnética nuclear de ^{13}C y espectrometría de masa para la dilucidación de estructuras de compuestos orgánicos integrando todas estas técnicas. En este curso se utilizan recursos apoyados por la Web, conferencias, experiencias de laboratorio, y trabajo en equipo para redactar una propuesta de investigación. Este curso está dirigido a los estudiantes de concentración en química y ciencias aliadas a la salud, a quienes capacita para entender los procesos biológicos e industriales del mundo que nos rodea.

JUSTIFICACIÓN

Los medicamentos, los textiles, los plásticos, los combustibles, los alimentos y los procesos biológicos ocurren en el diario vivir del ser humano. En estos procesos la química orgánica está presente. Por tanto, es importante que un estudiante que esté formándose como científico tenga conocimiento sobre cómo funciona la química orgánica. El curso tiene como propósito capacitar a los estudiantes para entender la química orgánica y así tener una base para poder entender los procesos que se dan en sistemas biológicos o en el medio ambiente. Esta rama de la química permea todo lo que ocurre en nuestro diario vivir.

COMPETENCIAS

El curso desarrolla en el o la estudiante las siguientes competencias:

- **Cuestionamiento crítico**
- **Investigación y exploración**
- **Comunicación**

OBJETIVOS

Al finalizar el curso el o la estudiante será capaz de:

1. Explicar las propiedades químicas de un sistema aromático.
2. Dilucidar la estructura molecular de un compuesto orgánico a base de sus espectros de infrarrojo, de masa, de resonancia magnética nuclear y de UV-VIS.
3. Explicar las propiedades químicas de los aldeídos, cetonas, ácidos carboxílicos y sus derivados y cómo esas propiedades ayudan a llevar a cabo síntesis orgánica.
4. Explicar las diferentes reacciones de condensación que se pueden llevar a cabo en compuestos orgánicos y su uso sintético.
5. Explicar las propiedades químicas de las aminas y cómo ayudan a llevar a cabo síntesis orgánica.
6. Explicar algunas propiedades químicas de compuestos orgánicos de importancia biológica.

CONTENIDO

- I. Aromaticidad
 - A. Resonancia
 - B. Teoría de orbitales moleculares
 1. Fundamentos
 - a. Orbitales moleculares enlazantes, antienlazantes y no enlazantes
 - b. Nodos
 - c. HOMO y LUMO
 2. Orbitales moleculares pi
 3. Sistema alilo
 4. Sistema 1,3-butadieno
 - C. Caso de la molécula de benceno
 1. Orbitales moleculares pi
 2. Orbitales degenerados

- D. Estructura de benceno
 - E. Propiedades de un sistema aromático
 - 1. Delocalización de electrones pi
 - 2. Estructura cíclica plana
 - 3. $4n + 2$ electrones pi
 - 4. Diagrama energético de orbitales moleculares pi
 - F. Propiedades de un sistema antiaromático
 - 1. Definición
 - 2. $4n$ electrones pi
 - 3. Diagrama energético de orbitales moleculares
 - G. Espectroscopia ultravioleta-visible (UV-VIS)
 - 1. Transiciones electrónicas
 - 2. Instrumentación
 - 3. Transmitancia y absorbencia
 - 4. Espectro de absorción y λ_{MAX}
 - 5. Efecto de disolvente sobre λ_{MAX}
 - 6. Reglas de Woodward-Fieser
 - a. polienos
 - b. cetonas y aldeídos conjugados
 - c. derivados de benceno
 - H. Sustitución electrofílica aromática
 - 1. Mecanismo general
 - 2. Reacciones de monosustitución
 - a. Halogenación
 - b. Nitración
 - c. Sulfonación
 - d. Alquilación Friedels-Craft
 - e. Acilación Friedels-Craft
 - 3. Orientadores orto, para y meta
 - 4. Efecto de resonancia e inductivo sobre la orientación en el producto
 - 5. Reacciones de derivados de benceno con grupos R y asilo
 - a. Oxidaciones
 - b. Reducciones
 - 6. Reacciones que utilizan la sal de diazonio
 - a. Condiciones
 - b. Rutas sintéticas a partir de la sal de diazonio
- II. Métodos espectroscópicos
- A. Espectroscopia de infrarrojo

1. Modos vibracionales
 - a. Alargamientos simétrico y asimétrico
 - b. Doblamientos
 - 1) Mecedora
 - 2) Tijera
 - 3) Giro
 - 4) Meneo
 2. Oscilador
 - a. Constante de fuerza del resorte
 - b. Número de onda
 3. Espectro de infrarojo
 - a. Región útil
 - b. Bandas anchas
 - c. Bandas agudas
 4. Grupos funcionales y número de onda
 - a. Alcanos
 - b. Alquenos
 - c. Alquinos
 - d. Alcoholes
 - e. Cetonas
 - f. Aldeídos
 - g. Ácidos carboxílicos y sus derivados
 - h. Nitrilos
 - i. Aminas
 - j. Derivados de benceno
 5. Variaciones en la frecuencia de absorción de carbonilo
 - a. Efecto de resonancia
 - b. Efecto inductivo
 - c. Tensión angular
 - d. Puentes de hidrógeno
 6. Ejemplos
- B. Espectrometría de masa
1. Instrumentación
 - a. Cámara de ionización
 - b. Separador de masas
 - c. Espectro de masa
 - 1) Razón masa a carga, m/z
 - 2) Abundancia relativa
 - 3) iii. Ion molecular
 - 4) Pico base

2. Patrones de fragmentación
 - a. Alcanos
 - b. Alquenos
 - c. Alquinos
 - d. Alcoholes
 - e. Éteres
 - f. Aromáticos
3. Rearreglo McLafferty
 - a. Aldehídos
 - b. Cetonas
 - c. Ácidos carboxílicos
 - d. Ésteres
 - e. Amidas
 - f. Anhidros
4. Compuestos halogenados
 - a. Patrones isotópicos de compuestos clorados
 - b. Patrones isotópicos de compuestos brominados
5. Ejemplos de espectros de masa
- C. Introducción a resonancia magnética nuclear de ^1H y ^{13}C
 1. Índice de insaturación
 - a. Significado
 - b. Fórmula para calcularlo
 2. Espín nuclear
 3. Campo magnético
 4. Proceso de NMR
 5. Escudamiento de hidrógenos
 6. Desplazamiento químico
 7. Equivalencia de protones
 - a. Hidrógenos homotópicos
 - b. Hidrógenos enantiotópicos
 - c. Hidrógenos diastereotópicos
 8. Acoplamiento espín-espín
 - a. Tipos de señales
 - 1) i. Singlete
 - 2) ii. Doblete
 - 3) iii. Triplete
 - 4) iv. Cuarteto
 - 5) v. Multiplete
 - b. Constante de acoplamiento
 9. Dilucidación de estructuras

10. Anisotropía magnética
 - a. Carbonilo
 - b. Alquenos
 - c. Alquinos
 - d. Aromáticos
11. Patrones de desdoblamiento que no siguen la regla de N+1
12. Resonancia magnética de ^{13}C
 - a. Principios
 - b. Espín nuclear de ^{13}C
 - c. Desplazamientos químicos característicos
 - d. Espectro de NMR ^{13}C
 - e. Ejemplos
 - f. Dilucidación de estructuras de compuestos orgánicos

III. Aldehídos, cetonas, ácidos carboxílicos y sus derivados

A. Aldehídos y cetonas

1. Nomenclatura de aldehídos y cetonas
2. Preparación de aldehídos y cetonas
 - a. Tautomerismo ceto-enol
 - b. Oxidación de alcoholes primarios
 - c. Adición de agua a alquinos
 - d. Oxidación de alcoholes primarios y secundarios
3. Reacciones de aldehídos y cetonas
4. Mecanismo de adición nucleofílica al carbonilo
 - a. Reactividad vía efecto estérico
 - b. Reactividad vía efecto inductivo
5. Adición de HCN: formación de cianohidrinas
6. Adición de alcoholes en medio ácido: formación de cetales y acetales
7. Adición de fosforano: la reacción de Wittig
8. Adición de 1,2-etanodiol: protección de grupos carbonilo en síntesis
9. Adición de hidroxilamina, hidracina, fenilhidrazina y fenil semicarbazona
10. Pruebas cualitativas de aldehídos y cetonas
 - a. Prueba de Tollens
 - b. Prueba de yodoformo

B. Ácidos carboxílicos y sus derivados

1. Nomenclatura IUPAC de ácidos carboxílicos
2. Preparación de ácidos carboxílicos
 - a. Oxidación de alcoholes, alquilbencenos y aldehídos.
 - b. Reacción Grignard con CO_2
 - c. Hidrólisis ácida de nitrilos.

- d. Purificación de ácidos carboxílicos
- 3. Reacciones de ácidos carboxílicos
 - a. Preparación de cloruros de acilo a partir de ácidos carboxílicos
 - b. Descarboxilación
 - c. Deshidratación de diácidos carboxílicos
 - d. Formación de cloruros de acilo a partir de SOCl_2 , PCl_3 y PCl_5
- 4. Preparación de derivados de ácidos carboxílicos
 - a. Estructura de los derivados de ácidos carboxílicos
 - 1) Cloruros de acilo
 - 2) Anhídros ácidos
 - 3) Nitrilos
 - 4) Ésteres
 - 5) Amidas
 - b. Mecanismo de sustitución nucleofílica acílica
 - 1) Orden de reactividad de los diferentes derivados
 - 2) Preparación de derivados de ácidos carboxílicos a partir de cloruros de acilo
 - 3) Preparación de derivados de ácidos carboxílicos a partir de anhídros ácidos
 - 4) Esterificación Fisher
 - 5) Hidrólisis de ésteres y amidas en medio ácido y básico
 - 6) Preparación e hidrólisis de nitrilos
- IV. Reacciones de condensación empleando enolatos
 - A. Condensación aldol
 - 1. Mecanismo
 - 2. Formación del sistema α , β insaturado
 - 3. Rutas sintéticas a partir del producto aldol y el sistema α , β insaturado
 - a. Reducción con NaBH_4 y LiAlH_4
 - b. Reducción con H_2 en Pd-C y en Ni
 - B. Condensación aldol cruzada
 - C. Condensación aldol cruzada práctica
 - D. Condensación Claisen-Schmidt
 - E. Ciclizaciones
 - F. Adición nucleofílica al carbono β de un sistema α, β insaturado
 - 1. Adición de Michael
 - 2. Anulación de Robinson
 - G. Condensación aldol en medio ácido
 - H. Síntesis de cetonas mono y disustituidas
- V. Aminas

- A. Nomenclatura de las aminas
 - B. Basicidad de las aminas
 - 1. Fortaleza básica
 - 2. Aminas vs. amidas
 - C. Preparación de aminas
 - 1. Sustitución nucleofílica S_N2
 - 2. Reacción de haluros de alquilo con azida seguido de reducción
 - 3. Reducción de compuestos nitro
 - 4. Síntesis de Gabriel
 - 5. Sustitución con derivados de NH_3 y reducción
 - 6. Reducción de nitrilos y amidas
 - 7. Reducción de oximas
 - 8. Rearreglo Hoffman
 - D. Purificación de aminas
 - E. Reacciones de aminas
 - 1. Oxidación con H_2O_2
 - 2. Eliminación Cope
 - 3. Eliminación Hoffman
- VI. Compuestos orgánicos de importancia biológica
- A. Carbohidratos
 - 1. Clasificación de carbohidratos
 - a. Monosacáridos
 - b. Polisacáridos
 - 2. Clasificación de monosacáridos
 - a. Cetosas
 - b. Aldosas
 - 3. Configuración D y L de las azúcares
 - 4. Familia de las D-aldosas y D-cetosas
 - 5. Estructuras cíclicas de monosacáridos
 - a. Caso de glucosa
 - b. Caso de fructosa
 - c. Piranosas y furanosas
 - 6. Anómeros en monosacáridos
 - a. Anómero α y el anómero β
 - b. Mutarrotación
 - 7. Reacciones de monosacáridos
 - a. Epimerización
 - b. Reducciones: alditoles
 - c. Oxidaciones

- 1) Agua de bromo
 - 2) Ácido nítrico
 - 3) Reacciones con HIO_4
 - d. Degradación de Ruff
 - e. Síntesis de Kiliani-Fisher
- B. Lípidos, aminoácidos y nucleótidos
1. Lípidos
 - a. Ceras
 - b. Ácidos grasos
 - c. Triglicéridos
 - d. Esteroides
 - e. Prostaglandinas
 - f. Terpenos
 2. Aminoácidos
 - a. Estructura de un amino ácido
 - b. Estereoquímica
 - c. Forma zwitteriónica
 - d. Enlace peptídico y estructura de un polipéptido
 3. Ácidos Nucléicos
 - a. Nucleótidos y ribonucleótidos
 - b. Nucleósidos y ribonucleótidos
 - c. Bases nitrogenadas
 - d. Grupos fosfatados
 - e. Polinucleótidos

EXPERIENCIAS DE LABORATORIO

- A. Seguridad en el laboratorio y "Safety Data Sheets"
- B. Síntesis de Ciclohexanol por la reducción de una cetona
- C. Preparación de butanoato de etilo por esterificación de Fisher
- D. Síntesis de Aspirina
- E. Síntesis de Ácido Maleánico
- F. Síntesis de N-fenilmaleimida
- G. Saponificación
- H. Preparación de dibenzalacetona

METODOLOGÍA

Se recomiendan las siguientes estrategias de la metodología de aprendizaje activo:

- Propuesta de investigación escrita
- Laboratorio
- Solución de un problema planteado
- Educación apoyada por la Web
- Investigación bibliográfica
- Simulaciones
- Conferencia
- Aprendizaje colaborativo y trabajo en equipo

EVALUACIÓN

Trabajos parciales	30%
Composiciones	20%
Examen o proyecto (final)	25%
Experiencia de inmersión	<u>25%</u>
TOTAL	100%

AVALÚO DEL APRENDIZAJE

Se aplica la rúbrica de avalúo institucional a la actividad central del curso.

BIBLIOGRAFÍA

TEXTO

Wade, L.G., Jr. & J. W. Simek (2016). *Organic Chemistry* (9.^a ed). Pearson.

Aponte, M., Rivera, Z. & Guntin, M. (2004). *Química Orgánica: Manual de laboratorio* Escala Micro, segunda parte (4.^a ed.). Librería Universal.

REFERENCIAS

Carey, F. (2019). *Organic Chemistry* (11.^a ed.). McGraw Hill Higher Education.

Karty, J. (2018). *Organic Chemistry: Principles and Mechanisms* (2.^a ed.). W. W. Norton & Company.

Klein, D. R. (2016). *Organic Chemistry* (3.^a ed.) Wiley.

Klein, D. R. (2016). *Organic Chemistry as a Second Language: First Semester Topics* (4.^a ed.). Wiley.

Klein, D. R. (2019). *Organic Chemistry as a Second Language, Second Semester Topics* (5.^a ed.) Wiley.

Mc Murry, J. E. (2015). *Organic Chemistry* (9.^a ed.). Cengage Learning.

Smith, J. (2018). *General, Organic and Biological Chemistry* (4.^a ed.) McGraw Hill Higher Education.

Stoker, H. S. (2015). *General, Organic and Biological Chemistry* (7.^a ed.). Cengage Learning.

Valiulin, R. (2020). *Organic Chemistry: 100 Must-Know Mechanisms in Organic Chemistry*. (1.^a ed.). De Gruyter.

Yurkanis, P. (2016). *Organic Chemistry* (8.^a ed.). Pearson.

RECURSOS ELECTRÓNICOS

American Chemical Society (n.d.) *ACS Chemistry for Life*.

<https://www.acs.org/content/acs/en.html>

International Union of Pure and Applied Chemistry. (n.d.) *International Union of Pure and Applied Chemistry*. <https://iupac.org/>

Puede encontrar más recursos de información relacionados a los temas del curso en la página de la biblioteca <http://biblioteca.sagrado.edu/>

ACOMODO RAZONABLE

Para obtener información detallada del proceso y la documentación requerida, debe visitar la oficina correspondiente. Para garantizar igualdad de condiciones, en cumplimiento de la Ley ADA (1990) y el Acta de Rehabilitación (1973), según enmendada, todo estudiante que necesite servicios de acomodo razonable o asistencia especial deberá completar el proceso establecido por la Vicepresidencia de Asuntos Académicos.

INTEGRIDAD ACADÉMICA

Esta política aplica a todo estudiante matriculado en la Universidad del Sagrado Corazón para tomar cursos con o sin crédito académico. Una falta de integridad académica es todo acto u omisión que no demuestre la honestidad, transparencia y responsabilidad que debe caracterizar toda actividad académica. Todo estudiante que falte a la política de honradez, fraude y plagio se expone a las siguientes sanciones: recibirá nota de cero en la evaluación y/o repetición del trabajo en el seminario, nota de F(*) en el seminario: suspensión o expulsión según se establece en el documento de Política de Integridad Académica con fecha de efectividad de noviembre 2022.

Derechos reservados | Sagrado | Noviembre, 2022