

QUÍMICA ORGÁNICA ECOCOMPATIBLE

Carrera: Tecnicatura Universitaria en Tecnología Ambiental y Petroquímica

Asignatura: Química Orgánica Ecompatible

Núcleo al que pertenece: Básico Obligatorio

Profesores: Lucas Andrés Dettorre, María Belén Sabaini

Prerrequisitos: Química General e Inorgánica

Objetivos:

Se espera que, al finalizar el curso, los/as estudiantes comprendan:

- que es posible construir distintos modelos de moléculas orgánicas, utilizando diferentes teorías químicas y químico cuánticas.
- cómo diferenciar grupos funcionales y cómo nombrarlos.
- cómo se relaciona la estructura molecular de un compuesto con sus propiedades físicas y químicas (relación estructura-propiedades).
- que es posible predecir las propiedades físicas y químicas de un compuesto orgánico a partir de su estructura molecular.
- los mecanismos de reacción más sencillos y sus diferencias.
- los diferentes lenguajes y la simbología específica que se utiliza para representar la estructura (fórmulas, proyecciones planas, modelos tridimensionales) y la reactividad (ecuaciones, mecanismos de reacción) de estos compuestos.
- las técnicas básicas aplicables a la separación y purificación de compuestos orgánicos y su desarrollo en el laboratorio.
- cómo realizar reacciones químicas sencillas en el laboratorio.
- cómo diseñar procesos químicos orgánicos más eficientes, que generen menos subproductos o desechos y que sean más compatibles con el ambiente.

Contenidos mínimos: Estructura de los compuestos orgánicos. Nomenclatura. Concepto de grupo funcional. Reactividad en Química Orgánica. Reactividad y propiedades físicas de hidrocarburos, compuestos halogenados, alcoholes y éteres, compuestos carbonílicos, ácidos y derivados. Mecanismos de reacción. Aspectos estructurales de compuestos polifuncionales y heterocíclicos. Caracterización de compuestos orgánicos. Procesos orgánicos de bajo impacto

ambiental. Rediseño de procesos químicos. Disolventes más seguros en Química Orgánica. Procesos redox ecocompatibles. Fuentes de energía alternativas para llevar a cabo procesos orgánicos sustentables. Materias primas renovables.

Carga horaria semanal: 6 horas.

Programa analítico:

- **Unidad 1 - Estructura de compuestos orgánicos.** Diferentes tipos de uniones carbono-carbono y carbono-heteroátomo. Geometría de enlaces. Enlaces conjugados. Resonancia. Hiperconjugación.
- **Unidad 2 - Nomenclatura de compuestos orgánicos.** Estructura de los distintos grupos funcionales: hidrocarburos, compuestos halogenados, oxigenados y nitrogenados. Compuestos heterocíclicos. Reglas de nomenclatura según IUPAC y de uso frecuente.
- **Unidad 3 - Relación estructura electrónica – propiedades físicas.** Polaridad, punto de fusión, punto de ebullición, solubilidad, acidez y basicidad. Efectos electrónicos (inductivo, mesomérico y de campo) y estéricos.
- **Unidad 4 - Isomería.** Definición. Índice de deficiencia de hidrógeno. Isomería estructural y espacial. Distintas proyecciones espaciales y planas. Estereoisomería conformacional, configuracional y óptica. Configuración absoluta. Quiralidad. Nomenclatura.
- **Unidad 5 - Introducción a las reacciones orgánicas.** Reacciones concertadas y en varios pasos. Dependencia de la velocidad. Mecanismos homolíticos, heterolíticos (nucleofílicos y electrofílicos) y pericíclicos. Intermediarios de reacción: carbaniones, carbocationes, radicales libres; formación y estabilidad. Mecanismos de sustitución, adición, eliminación, oxidación, reducción, en cadena.
- **Unidad 6 - Propiedades químicas de grupos funcionales I.** Alcanos y cicloalcanos, halogenuros de alquilo, alquenos, alquinos, hidrocarburos aromáticos, arenos, halogenuros de arilo, sales de diazonio. Obtención y caracterización. Reacciones radicalarias, de sustitución nucleofílica alifática, de eliminación, de adición electrofílica, de sustitución nucleofílica y electrofílica aromática; mecanismos y características. Reacciones de caracterización.

- **Unidad 7 - Propiedades químicas de grupos funcionales II.** Alcoholes, éteres, aldehídos, cetonas, ácidos y derivados de ácidos. Obtención y caracterización. Reacciones de adición nucleofílica, de oxidación, de reducción y de sustitución nucleofílica; mecanismos y características. Acidez de hidrógenos α . Aplicación a biomoléculas: formación de uniones glicosídicas y peptídicas, saponificación de glicéridos. Reacciones de caracterización.

- **Unidad 8 - Aislamiento e identificación de los componentes de una mezcla.** Métodos de extracción. Extracción con solventes. Equilibrio de distribución entre dos fases líquidas. Extracción ácido-base. Desecantes. Separación de productos de reacción. Cromatografía. Fenómenos de adsorción y partición. Técnicas cromatográficas: cromatografía en capa delgada y en columna. Criterios de pureza e identificación.

- **Unidad 9 - Purificación de líquidos.** Punto de ebullición. Diagramas de equilibrio líquido-vapor para líquidos miscibles e inmiscibles. Curvas de calentamiento. Destilación: purificación y separación de mezclas. Destilación simple y fraccionada. Destilación a presión reducida. Destilación por arrastre con vapor.

- **Unidad 10 - Purificación de sólidos.** Punto de fusión como criterio de pureza. Diagramas de equilibrio sólido-líquido. Punto de fusión mezcla. Purificación por recristalización. Elección del solvente. Sublimación.

- **Unidad 11 – Introducción a los materiales orgánicos ecocompatibles.** Materiales orgánicos. Polímeros orgánicos. Propiedades. Biopolímeros. Biodegradabilidad. Síntesis de polímeros. Solventes ecocompatibles. Éteres y ésteres. Líquidos iónicos. *Deep eutectic solvents* (DES). Fluidos supercríticos. Toxicidad y alternativas de uso. Materias primas renovables. Reutilización, reciclado y puesta en valor de residuos orgánicos. Sustancias orgánicas como xenobióticos.

- **Unidad 12 – Introducción a los procesos orgánicos ecocompatibles.** Rediseño e ingeniería de reacciones orgánicas. Modificación de variables físicas y químicas: concentración de reactivos, temperatura, solvente, etc. Alternativas ecoamigables: organocatálisis, biocatálisis, reacciones libres de solventes. Biocatálisis enzimática. Tipos de enzimas.

Bibliografía:

- Guías de estudio y resolución de problemas de la asignatura.
- Guías de trabajos prácticos de laboratorio.
- Ege, "Química Orgánica", Ed. Reverté.
- Fessenden, Fessenden, "Química Orgánica", Grupo Editorial Iberoamericano.
- Mc Murry, "Química Orgánica", Addison-Wesley Iberoamericana.
- Morrison & Boyd, Química Orgánica, Addison-Wesley Iberoamericana.
- Streitwieser, Química Orgánica, Mc Graw Hill.
- Volhard, Química Orgánica, Omega.
- Allinger, Química Orgánica, Reverté.
- Fernández Cirelli, Deluca, Aprendiendo Química Orgánica, EUDEBA.
- Carey, Química orgánica, Mc Graw Hill.
- Wade, Química Orgánica, Prentice Hall.
- Fox, Química Orgánica, Pearson.
- Faber, Biotransformations in Organic Chemistry: A textbook, Springer.
- Gros, Introducción al estudio de los productos naturales, OEA.
- Seymour, Introducción a la química de los polímeros, Reverté.
- Raiswell, Química ambiental, Omega.
- Galagovsky, "Laboratorio de Química Orgánica", Eudeba.
- Palleros, Experimental Organic Chemistry, Wiley.

Bibliografía de consulta:

- March, "Advanced Organic Chemistry", John Wiley & Sons.
- Weast, CRC Handbook of Chemistry & Physics, CRC Press.
- Tatchell et al, Vogel's Textbook of Practical Organic Chemistry, Longman/John Wiley & Sons.
- Schriner, Fuson, Identificación de Compuestos Orgánicos, Limusa.
- Pasto, Johnson, Determinación de Estructuras Orgánicas, Reverté.
- Hart, Craine, Hart, Química Orgánica Mc Graw Hill.
- Perrin, Amarego, Purification of Laboratory Chemicals Butterworth-Heinemann.
- Shugar Ballinger, Chemical Technicians' ready reference Handbook, Mc Graw Hill.
- Gilchrist, Química heterocíclica, Addison-Wesley Iberoamericana.
- Peterson, Formulación y nomenclatura Química Orgánica, EUNIBAR.
- Sawyer, Química para ingeniería ambiental, McGraw-Hill.

En la Bibliografía no se consigna el año ya que se consideran apropiadas las diferentes ediciones.

Organización de las clases: Las clases serán de carácter teórico-práctico y consistirán en una exposición dialogada por parte de lo/as docentes de los temas del día, la discusión grupal de los contenidos y un espacio de seminario destinado a la resolución de problemas.

Asimismo, se desarrollarán cuatro experiencias de laboratorio relacionadas con las operaciones unitarias, los procesos sustentables y las reacciones estudiadas y una experiencia integradora final (TPI) en la cual, grupalmente, lo/as estudiantes deberán investigar, desarrollar y exponer los resultados de una experiencia de laboratorio relacionada a alguno/s de los siguientes tópicos o estrategias: (a) desarrollo de una síntesis química eco-amigable de compuestos de interés; (b) desarrollo de estrategias de purificación ecocompatibles; (c) empleo de biocatalizadores para la biosíntesis de compuestos de interés o para el saneamiento ambiental; (d) preparación de nuevos materiales ecoamigables orgánicos; (e) puesta en valor de residuos orgánicos de origen industrial o domiciliario.

Los contenidos serán desarrollados de acuerdo al programa analítico y siguiendo lo estipulado en el cronograma de la asignatura. Las guías de estudio deberán ser resueltas con anterioridad a las clases por lo/as estudiantes.

Detalle de las actividades prácticas: Incluye la resolución de problemas en el aula y la realización de trabajos prácticos (TP) de laboratorio. Los TP propuestos son:

- TP1: Separación de compuestos de una mezcla orgánica mediante extracciones ácido base.
- TP2: Cromatografía en columna adsorbtiva.
- TP3: Síntesis y purificación de un sólido mediante recristalización.
- TP4: Destilación simple y fraccionada de mezclas de líquidos.
- TPI: TP integrador.

Modalidad de evaluación: Se rendirán tres exámenes parciales, calificados sobre 10 puntos cada uno. Un ausente equivale a una calificación de 0 puntos. Todos ellos constan de su respectiva instancia recuperatoria. Los contenidos evaluados en cada examen corresponden a los de las unidades 1 a 4, 5 a 7, y 8 a 12, respectivamente.

La asistencia a las clases de laboratorio es obligatoria. El trabajo no realizado por ausencia o desaprobado (20% como máximo, uno solo si son 5 -cinco-) debe recuperarse en las fechas propuestas en cada curso. No se considerarán excepciones de ningún tipo.

Para la aprobación de los TP experimentales, se evaluará el uso adecuado del cuaderno del laboratorio, la calidad y precisión de los datos obtenidos, la presentación oral y escrita del trabajo realizado y el desempeño en el laboratorio. Además, deberá aprobarse un parcialito de laboratorio por cada TP; de cuya aprobación dependerá la permanencia en el laboratorio. Al finalizar, deberán redactar un informe grupal antes de cumplidos los quince días de realización del TP. En caso de desaprobalo, deberán rehacerlo según las indicaciones de los docentes.

Todos lo/as estudiantes deberán desarrollar un trabajo práctico integrador (TPI) con carácter de proyecto de investigación, en el que deberán, por grupos:

- Proponer y desarrollar protocolos para llevar a cabo un proceso orgánico ecocompatible.
- Llevarlo a la práctica y analizar los resultados obtenidos.
- Exponer los resultados obtenidos y conclusiones de manera grupal, tanto oralmente como por escrito (Informe del TPI).

Los contenidos evaluados en este TPI serán los correspondientes a las unidades 8 a 12, principalmente.

Aprobación de la asignatura según Régimen de Estudios vigente de la Universidad Nacional de Quilmes (Res. CS N° 201/18):

Alternativa A (promoción)

- Aprobar los trabajos prácticos con calificación mayor o igual a 6 puntos
- Reunir entre los tres parciales y el TPI no menos de 28 puntos, obteniendo una calificación mínima de 6 puntos en cada uno de ellos y únicamente en la primera instancia. Quien desaprueba o no se presenta (tiene ausente) en la primera instancia parcial, pasará automáticamente al régimen de aprobación descrito en la alternativa B.

Alternativa B

- Aprobar los trabajos prácticos con calificación mayor o igual a 6 puntos
- Obtener una calificación mínima de 4 puntos en cada uno de los parciales y el TPI.
- En caso de no cumplir el requisito anterior, deberá rendir y aprobar con un mínimo de 4 puntos un parcial recuperatorio de cada uno de los parciales desaprobados.
- El TPI se recuperará de diferentes maneras, acordando entre estudiantes y docentes la reelaboración del trabajo escrito o la evaluación escrita mediante un parcialito especial que profundice en los temas abordado en él.
- Aprobar un examen integrador. Para rendir este examen integrador se cuenta con 3 fechas, una dentro del cuatrimestre y dos estipuladas en el calendario académico, existiendo la posibilidad de presentarse en todas.

Todo estudiante que no se encuentre contemplado en las alternativas A o B desaprueba la asignatura. Esto supone que el alumno/a ya ha agotado todas las instancias de evaluación. Desde la perspectiva de lo/as docentes de esta asignatura, esto significa que la última instancia es la tercera fecha de integración y por lo tanto en el acta y en la foja académica quedará consignado lo siguiente:

- Ausente: en caso de desaprobar la instancia recuperatoria correspondiente a alguno de los parciales (al no llegar a la etapa de integración, no agota todas las instancias posibles).
- Reprobado (nota menor a 4 (cuatro)): en caso de desaprobar la tercera instancia de integrador.
- Pendiente de aprobación: cuando se han aprobado las instancias parciales sin alcanzar promoción (alternativa B) y se adeuda el integrador.

CRONOGRAMA TENTATIVO

Semana	Tema/unidad	Actividad*				Evaluación
		Teórico	Práctico			
			Res Prob.	Lab.	Otros Especificar	
1	Estructura de compuestos orgánicos y nomenclatura / Unidad 1 y 2	X	X			
2	Propiedades físicas y químicas / Unidad 3	X	X			
3	Isomería / Unidad 4	X	X			
4	Repaso / Primer parcial (Unidades 1 a 4)	X	X			X
5	Alcanos, alquenos y alquinos / Unidades 5 y 6	X	X			
6	Halogenuros de alquilo y alcoholes / Unidades 6 y 7	X	X			
7	Compuestos aromáticos / Unidad 6	X	X			
8	Compuestos carbonílicos y derivados de ácido / Unidad 7	X	X			
9	Métodos separativos y purificación de compuestos orgánicos /Unidades 8, 9, 10 / Propuesta y selección por grupos del tema para el TPI Segundo parcial (Unidades 5 a 7)	X	X			X
10	Materias primas, solventes y polímeros ecocompatibles / Unidad 11 / TP 1	X	X	X		X
11	Procesos orgánicos ecocompatibles / Unidad 12 / TP 2	X	X	X		X
12	Organocatálisis y biocatálisis / Unidad 12 / Discusión de protocolos para el TPI/TP 3	X	X	X		X
13	Revalorización de residuos orgánicos / Unidad 11 / TP 4	X	X	X		X
14	Desarrollo del TPI en el laboratorio			X		X
15	Repaso / Tercer parcial (Unidades 8 a 12)	X	X			X

16	Cierre experimental del TPI / Exposición y entrega de informes del TPI / Recuperatorio Primer Parcial			X		X
17	Recuperatorios de Segundo y Tercer Parcial					X
18	Consultas / Integrador / Cierre de actas		X			X