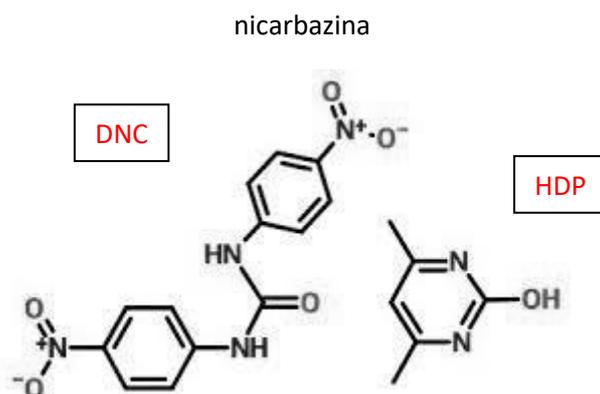


Recuperatorio TP 1 – 2021

- 1) La siguiente imagen representa un preparado conocido como NICARBAZINA, de uso veterinario. Es una mezcla equimolar de DNC con HDP. La molécula DNC es la biológicamente activa pero requiere la presencia de la HDP para ser absorbida por las aves, debido a su baja solubilidad en agua. Identifique cual es cual, justificando su respuesta según la solubilidad.

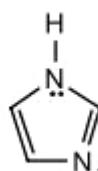
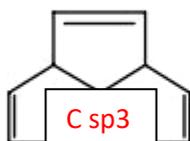
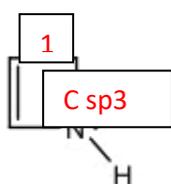


RESPUESTA

La molécula DNC es de alto peso molecular, los puentes de hidrógeno que puede formar son muy débiles y la solvatación con agua será deficiente. Por lo tanto, será una molécula con baja solubilidad en agua. Por el contrario, la molecular HDP es pequeña, polar, con un OH capaz de formar puente de hidrogeno con el agua y el agua podrá solvatarla más eficientemente. Por lo tanto será mas soluble en agua.

- 2) Determine para cada compuesto si se trata de una especie aromática, antiaromática o no aromática. JSR.

RESPUESTA:



Cíclica

Cíclica

Cíclica

Cíclica

No plana

No plana

Plana

Plana

NO AROMÁTICA

NO AROMÁTICA

Sistema pi conjug. Sistema pi conjug.

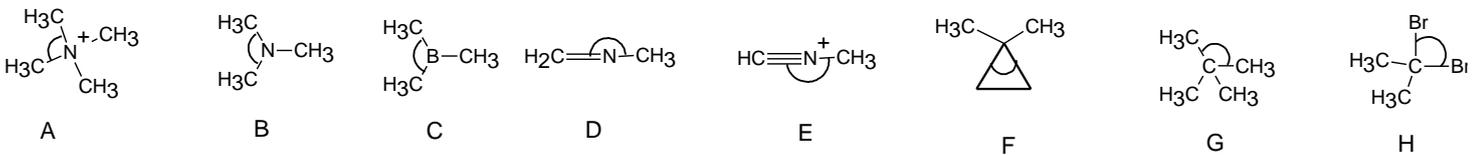
Hückel: $n=1$

Hückel: $n=1/2$

AROMÁTICA

ANTIAROMÁTICA

- 3) Ordene de menor a mayor los ángulos de enlace indicados en cada estructura y brinde una explicación del orden dado. Si hay moléculas que tienen igual ángulo, indíquelo con el signo “=”.

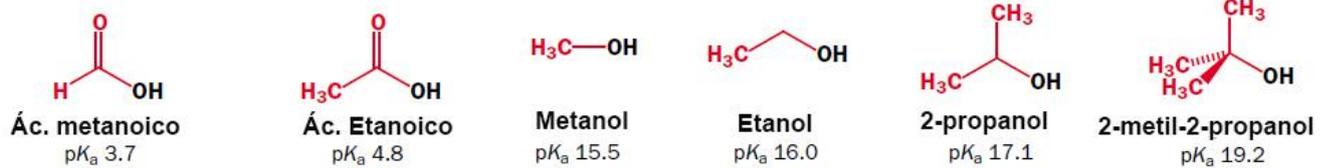


RESPUESTA:



Se debe tener en cuenta la hibridación del átomo central. En F el carbono está en un ciclopropano: ángulo próximo a 60° . En F, B, A, G y H el elemento central es tetrahédrico (SP^3), el ángulo neto dependerá del agolpamiento. A y G no difieren pues tienen 4 sustituyentes iguales, igual que C y D, dado que el átomo central en ambos tiene hibridación SP^2 . E es el de mayor ángulo pues el nitrógeno es SP .

- 4) Brinde una explicación para el orden creciente en los valores de pK_a observados para las siguientes moléculas



RESPUESTA:

Los ácidos metanoico y etanoico son los más ácidos (menor pK_a) por la estabilización del carboxilato, por resonancia. El etanoico tiene $> pK_a$ por el efecto inductivo del metilo. Los alcoholes tienen pK_a 's notablemente mayores porque el anión alcóxido no posee estabilización por resonancia. El aumento gradual de pK_a , desde metanol a 2-metil-2-propanol, se debe al aporte inductivo creciente de los sustituyentes.