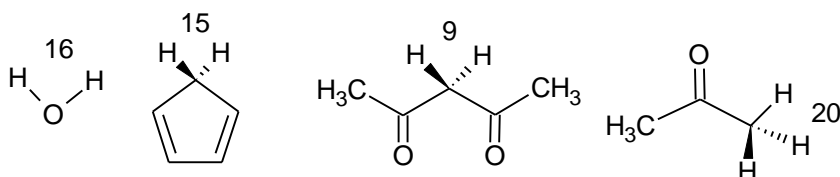


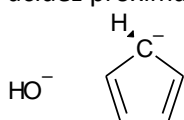
QUÍMICA ORGÁNICA I

Recuperatorio 1er parcial TP 2020 Resuelto

- 1) Para los siguientes compuestos se resaltan los hidrógenos ácidos, junto con sus respectivos valores valores de pKa.

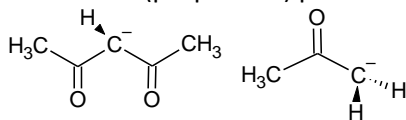


- a. Ordénelos en según la acidez creciente.
ACETONA < AGUA < CICLOBUTADIENO < ACETILACETONA
- b. ¿Cómo se explica que el ciclopentadieno, siendo un hidrocarburo, tenga una acidez próxima a la del agua?



El más ácido es el que tenga el anión más estable. El anión del ciclobutadieno, es aromático, la carga estará más extendida y por lo tanto, la densidad electrónica será menor, mientras que en el oxidrilo la carga está localizada sobre el oxígeno.

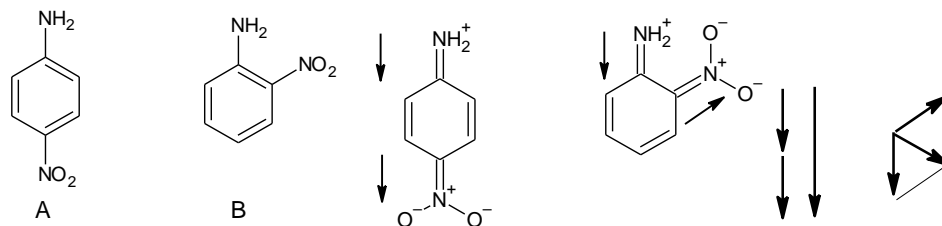
- c. La acetona (propanona) posee un pKa mayor que la 2,4-pentanodiona ¿Por qué?



El anión de la izquierda es más estable, pues la carga resuena en cinco centros, mientras que el anión de la derecha resuena en tres. Mientras más extendida sea, menor es la densidad electrónica.

- d. De acuerdo con estos resultados ¿Se puede afirmar que una mayor electronegatividad de los átomos es determinante de la acidez de estas moléculas? **No, no es la electronegatividad. En b y c vemos que la resonancia influye más.**

- 2) El momento dipolar medido en la 4-nitroanilina (A) es de 6.2 D, mientras que en la 2-nitroanilina (B) es de 4,26 D. Brinde una explicación para los valores encontrados que tenga en cuenta las estructuras de resonancia más favorables.



La estructura de resonancia más estable en A tiene los vectores polarización con igual dirección y sentido, su suma es aditiva. En B la estructura más estable muestra que la suma vectorial da como resultado un vector suma mucho más reducido.

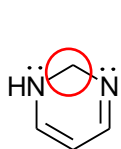
- 3) La siguiente tabla muestra los puntos de fusión y ebullición para los tres isómeros estructurales de cadena de fórmula C_5H_{12} . Explique porque se observan diferencias si el peso molecular es el mismo para las tres moléculas.

Isómero	n-Pentano	2-Metilbutano	2,2-Dimetilpropano
Punto de ebullición ($^{\circ}C$)	36	28	9
Punto de fusión ($^{\circ}C$)	-130	-160	-17

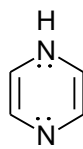
En cuanto al punto de ebullición, el que ebulle a mayor temperatura es el isómero lineal (n-pentano) ya que su mayor superficie de contacto entre moléculas hace más intensas las interacciones dipolo-dipolo inducido y se debe entregar más energía para cambiar de estado. Sigue el 2-metilbutano con una ramificación y el que tiene menor punto de ebullición es el que tiene más ramificaciones (2,2-dimetilpropano) ya que posee la menor superficie de contacto, es decir, las interacciones menos intensas.

En cuanto al punto de fusión, el que funde a mayor temperatura es el más ramificado (2,2-dimetilpropano) ya que posee la estructura más redondeada y simétrica, la cual se acomoda mejor en la red cristalina del sólido. Esto implica que se requiere mayor energía para separar las moléculas en el sólido y cambiar a estado líquido. La diferencia entre los dos compuestos restantes se debe a la diferencia en la simetría de las moléculas: la molécula lineal n-pentano es más simétrica que la molécula ramificada de 2-metil butano, menor simétrica. La simetría implica la posibilidad de formar una red cristalina más perfecta y repetitiva, lo que aumenta la energía de cohesión de la red y se traduce en un aumento del punto de fusión. Por esta razón, n-pentano tiene mayor punto de fusión que 2-metilbutano.

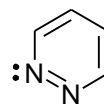
- 4) Identifique cuáles de estas especies son aromáticas, antiaromáticas y no aromáticas. JSR.



1



2



3

Molécula 1

El carbono marcado tiene hibridación sp^3 , por lo tanto la molécula no es plana. Se trata de una especie NO AROMÁTICA.

Molécula 2

Si se considera que ambos nitrógenos tienen hibridación sp^2 y el ciclo fuera entonces plano, la molécula sería antiaromática. Esto implicaría un estado energético muy elevado. Para evitar la antiaromaticidad, uno de los nitrógenos presenta hibridación sp^3 lo que permite que el ciclo tenga un plegamiento, es decir, no es plano. Se trata de una especie NO AROMÁTICA.

Molécula 3

El ciclo es plano con un sistema pi conjugado y cumple con la regla de Hückel ($4n+2=6$; $n=1$). Se trata de una molécula AROMÁTICA.

Cada pregunta suma 8 puntos.

TOTAL DE PUNTOS = 32