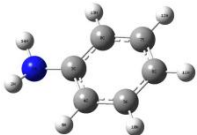



La Enseñanza de Química Orgánica a través de Programas Computacionales

Silvana Caglieri¹ y Mariángeles Pagnan¹

¹ CIQA-Centro de Investigación y Transferencia en Ingeniería Química Ambiental. Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional Córdoba. Argentina. scaglieri@quimica.frc.utn.edu.ar

La asignatura Química Orgánica se dicta en el segundo año de la carrera de Ingeniería Química en la Universidad Tecnológica Nacional. Es una asignatura cuatrimestral, extensa y su contenido tiene una naturaleza frecuentemente abstracta, siendo esta una de las mayores dificultades que deben enfrentar los estudiantes. El objetivo de esta presentación consiste en mostrar como se trabajan los contenidos de la asignatura mediante el empleo de un software Gaussian⁰³ a través de actividades propuestas por la cátedra. El alumno debe diseñar y optimizar la estructura de un compuesto orgánico seleccionado previamente y calcular sus longitudes de enlace, ángulos de enlace y energía del mismo, fomentando de esta manera la investigación a través del empleo de herramientas computacionales. Para realizar los cálculos mencionados el estudiante debe utilizar el método DFT y dentro de este emplear B3LYP con función de base 3-21G* y para el cálculo de las energías correspondientes debe utilizar el método semiempírico AM1. A modo de ejemplo en la Tabla se muestran las estructuras de dos aminas con algunos de sus parámetros geométricos, reportándose además las energías de cada una de ellas. El reemplazo de un hidrogeno por un grupo metilo, más voluminoso, se asocia a un aumento de la energía o entalpía de formación.

Amina	Estructura	Longitud de Enlace (Å)	Ángulo de Enlace (°)	Energía kcal mol ⁻¹
Anilina		C-H = 1.09 C-N = 1.39 N-H = 0.99	C ₈ -C ₃ -N = 120.71 H-N-C = 114.21 H-C ₈ -C ₃ = 120.14	20.38
Metil Anilina		C ₁₄ -N = 1.43 C ₃ -N = 1.40 N-H = 0.99	C ₄ -C ₃ -N = 122.09 H ₁₃ -N-C ₃ = 112.84 C ₁₄ -N-C ₃ = 118.93	24.08

El empleo de software consiste en una herramienta imprescindible a la hora de abordar los contenidos, ya que mediante la visualización e interacción con el mismo, el alumno logra interpretar e internalizar más fácilmente los diferentes conceptos.

Referencias

Zhao Y., Schultz N. E. and Truhlar D. G. (2006) *Design of Density Functionals by Combining the Method of Constraint Satisfaction with Parametrization for Thermochemistry, Thermochemical Kinetics, and Noncovalent Interactions*. J. Chem. Theory Comput., 2, 364-382.