

# LA CARGA TEÓRICA DE LAS PREGUNTAS EN LA ENSEÑANZA DE QUÍMICA ORGÁNICA II

## THEORETICAL CONTENTS OF THE QUESTIONS IN THE TEACHING OF THE SUBJECT ORGANIC CHEMISTRY II

**Viviana Wright<sup>1</sup>, Alejandro Cavassa<sup>1</sup>, Camila Di Genaro<sup>1</sup>, César Micheli<sup>1</sup>**

(1) Universidad de Morón, Cabildo 134, 1708 Morón - Argentina  
(e-mail: vivianalwright@gmail.com)

*Recibido: 08/06/2019 - Evaluado: 20/08/2019 - Aceptado: 30/09/2019*

### RESUMEN

En este trabajo se presenta una propuesta pedagógica de la cátedra de Química Orgánica II de las carreras de Bioquímica y Licenciatura en Ciencias Químicas, que consiste en proponerle a los alumnos diez preguntas ricas en actos metacognitivos, a resolver, algunas de ellas, mediante la química computacional, utilizando el software Gaussian 0.9W Revision-C0.1 y/o similares. Estas preguntas, correspondientes a la unidad I del programa de contenidos de dicha materia: "Tratamiento Unificado de las Sustituciones Nucleofílicas y Electrofílicas sobre la base del desarrollo de carga en el Intermedio de reacción"; que tienen el objetivo de estimular la reflexión en los estudiantes, sirven como vías de acceso a la comprensión y se centran en el aprendizaje a largo plazo, se trabajarán en pequeños grupos. Concluyendo que, de este modo, se favorece el rol activo de los estudiantes en su aprendizaje, aprovechando la "fuerza de los pares".

### ABSTRACT

This paper presents a pedagogical approach on the subject Organic Chemistry II for the courses of study of Biochemistry and Degree in Chemical Science in the University of Morón. Its aim is to submit students to a ten-question questionnaire which involves metacognitive activities which might require them to resort to Computational Chemistry, using the Gaussian 0,9 W Revision, C0.1 and/or similar software. These questions, corresponding to unit I of the program of contents of said subject matter: unified treatment of nucleophilic and electrophilic substitution based on charge development on the reaction intermediate, whose aim is to stimulate the student's reflection as well as the key access to comprehension. They are designed on the base of long-term learning strategies and are to be worked on in reduced groups. We believe this working scheme will favour student's active rol of learning through a process that will be improved by collaborative group work.

Palabras clave: preguntas hermenéuticas, química computacional, aprendizaje a largo plazo, química orgánica  
Keywords: hermeneutic questions, computational chemistry, long-term learning, organic chemistry

## INTRODUCCIÓN

En esta sociedad aumentada (Reig, 2013), en la cual la utilización de herramientas tecnológicas le permite al alumno la posibilidad de expandir la zona de desarrollo próximo (Vigotsky), se debería redefinir nuestro rol docente (Borges, 2005), tendiendo a favorecer la participación activa de los estudiantes en la construcción del conocimiento, intentando formular las preguntas adecuadas.

En este trabajo se presenta una propuesta pedagógica de la cátedra de Química Orgánica II, de las carreras de Bioquímica y Licenciatura en ciencias Químicas de la Universidad de Morón, que consiste en proponerle a los alumnos preguntas hermenéuticas, ricas en actos metacognitivos, a resolver algunas de ellas mediante la Química Computacional, empleando el software Gaussian 0.9 W Revision C0.1 u otros similares; con el objeto de facilitar el acceso a la comprensión, la autonomía y el aprendizaje a largo plazo de los estudiantes (Quintanilla, 2014).

Frente a las dificultades que presentan los alumnos para operar con el objeto de conocimiento en los distintos niveles de acceso al mismo: contenidos, resolución de problemas, epistémico y de investigación y a las posibilidades que brinda la tecnología consideramos pertinente ampliar y optimizar la propuesta pedagógica de la cátedras mencionadas, incorporando a la guía de problemas preguntas para cada unidad, incluyendo el uso de tecnologías informáticas, proponiéndole a los alumnos situaciones problemáticas a resolver mediante la química computacional.

Para que un desafío intelectual sea valioso y el estudiante lo enfrente y solucione comprensivamente, es imprescindible que utilice sus conocimientos conceptuales, procedimentales y actitudinales. En este sentido, siguiendo a Quintanilla (2014) (1), es "clave" la formulación de una "buena pregunta", rica en actos metacognitivos, que estimule el pensar teórico y promueva la reflexión.

Según Gadamer (1994), (2), preguntar quiere decir abrir, abrir la posibilidad al conocimiento, ya que preguntar y pensar son dos procesos intelectuales inseparables. Estas preguntas esenciales que estimulan la reflexión, la investigación o nuevas preguntas, sirven como vías de acceso a la comprensión y se centran en el aprendizaje a largo plazo. Son abiertas, generan debate o discusión, estimulan el pensamiento de orden superior como el análisis, la inferencia, la predicción, sugieren nuevas preguntas, requieren justificación y argumentación, favorecen la teorización y la modelización, son hermenéuticas, abarcadoras, estimulan el proceso de auto-aprendizaje, despiertan la curiosidad e incentivan la creatividad.

## METODOLOGÍA

En el presente trabajo, se presenta el cuestionario referido a la Unidad I: Tratamiento unificado de las Sustituciones nucleofílicas y electrofílicas aromáticas sobre la base del desarrollo de carga en el intermedio de reacción, del programa de la materia.

### Cuestionario Unidad I

El análisis computacional usado como herramienta predictiva, en un marco didáctico, permite encarar de manera aproximada el desarrollo energético de reacciones orgánicas sencillas.

1. En el presente caso se pudo determinar por modelado molecular de reactivos e intermedios y energías correspondientes, que la reacción mostrada en la Figura 1, puede ocurrir por dos vías alternativas (una no excluyente a la otra).

Se trata de dos sustituciones nucleofílicas (sobre carbono acíclico una y sobre carbono aromático la otra, Cappetta & Michelli, 2016) y los cálculos desarrollados indican que:

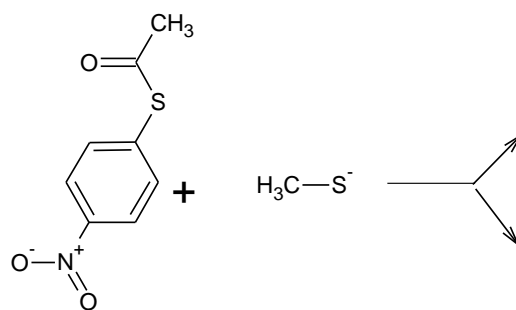


Fig. 1: Reacción en estudio

(Aclaración: el compuesto puede tener uno o dos grupos nitro en orto o para respecto al átomo de azufre)

- Se invierte la reactividad de ambos centros electrofílicos si se duplica el número de grupos nitro
- El incremento de grupos nitro modifica más la reactividad del electrófilo aromático respecto al alifático.

Se propone:

- a. Formular los productos de ambas vías
- b. Simular, mediante el uso del software sugerido, el diseño de los productos de ambas vías (Cappetta & Micheli, 2019)
- c. Interpretar los casos A y B mediante un enfoque cualitativo en términos de efectos electrónicos inductivos y mesoméricos aplicados a reactivos e intermedios (Cavassa, 2017)

Nota: los cálculos han sido desarrollados sin tener en cuenta efectos de solvatación y con finalidades fundamentalmente didácticas.

2. La nitración del anillo bencénico desarrollada con mezcla sulfonítrica en relación molar  $\text{HNO}_3:\text{H}_2\text{SO}_4$  1:2 ocurre con mecanismo  $\text{SEAr}_2$ , pero la cinética del proceso no se corresponde con una bimolecularidad (de orden 1 respecto al sustrato y orden 1 respecto al electrófilo), sino que resulta ser de orden mixto. Se supone que el proceso de generación del electrófilo  $\text{NO}_2^+$  interfiere y sea responsable de este hecho.
  - a. Desarrolle una sucesión de tres equilibrios acoplados que se correspondan con la generación del electrófilo en el segundo de ellos
  - b. Justifique la estabilidad del intermedio de Wheland (Ege, 2008), respecto al primer estado de transición.
  - c. Se observa que la segunda nitración ocurre más lentamente a paridad de condiciones y que el porcentaje de isómero meta es predominante, justifique lo expuesto.
3. La cloración y bromación (Wade, 2017) del tolueno indican que la velocidad de reacción, a paridad de condiciones, resulta ser mayor en el caso de la cloración, pero el porcentaje de isómero para resulta ser mayor en el segundo caso. ¿Son estos hechos contradictorios? Justifique cualitativamente su respuesta.
4. Ocurre en ocasiones, que el ataque en posición orto sobre un derivado bencénico monosustituido no se corresponde con las reglas de orientación que surgen del análisis electrónico elemental generalmente usado (efectos mesomérico, inductivo e hiperconjugativo, Carey, 2014) para justificar las orientaciones posibles ¿Cómo podría explicar lo anteriormente expuesto?
5. ¿Cuál o cuáles de los siguientes gráficos Figura 2 son compatibles con la ausencia de efecto isotópico de deuterio en la  $\text{SEAr}$ ? (Sykes, 1986).
6. La  $\text{SNuAr}_2$  y la  $\text{SEAr}_2$  ocurren de tal manera, que el efecto orientador de grupos preexistentes en el anillo atacado resulta invertido a paridad de grupo considerado (Bruice, 2007). Justifique lo afirmado comparando la distribución electrónica en un intermedio de Wheland y en uno de Meissenheimer.
7. Considere el efecto del pH en la formación de fenol a partir de anilina, vía sales de diazonio (Mc Murry, 2016), indicando como puede influir este sobre los equilibrios que se manifiestan en fase acuosa ¿Por qué no es conveniente utilizar ácido clorhídrico?

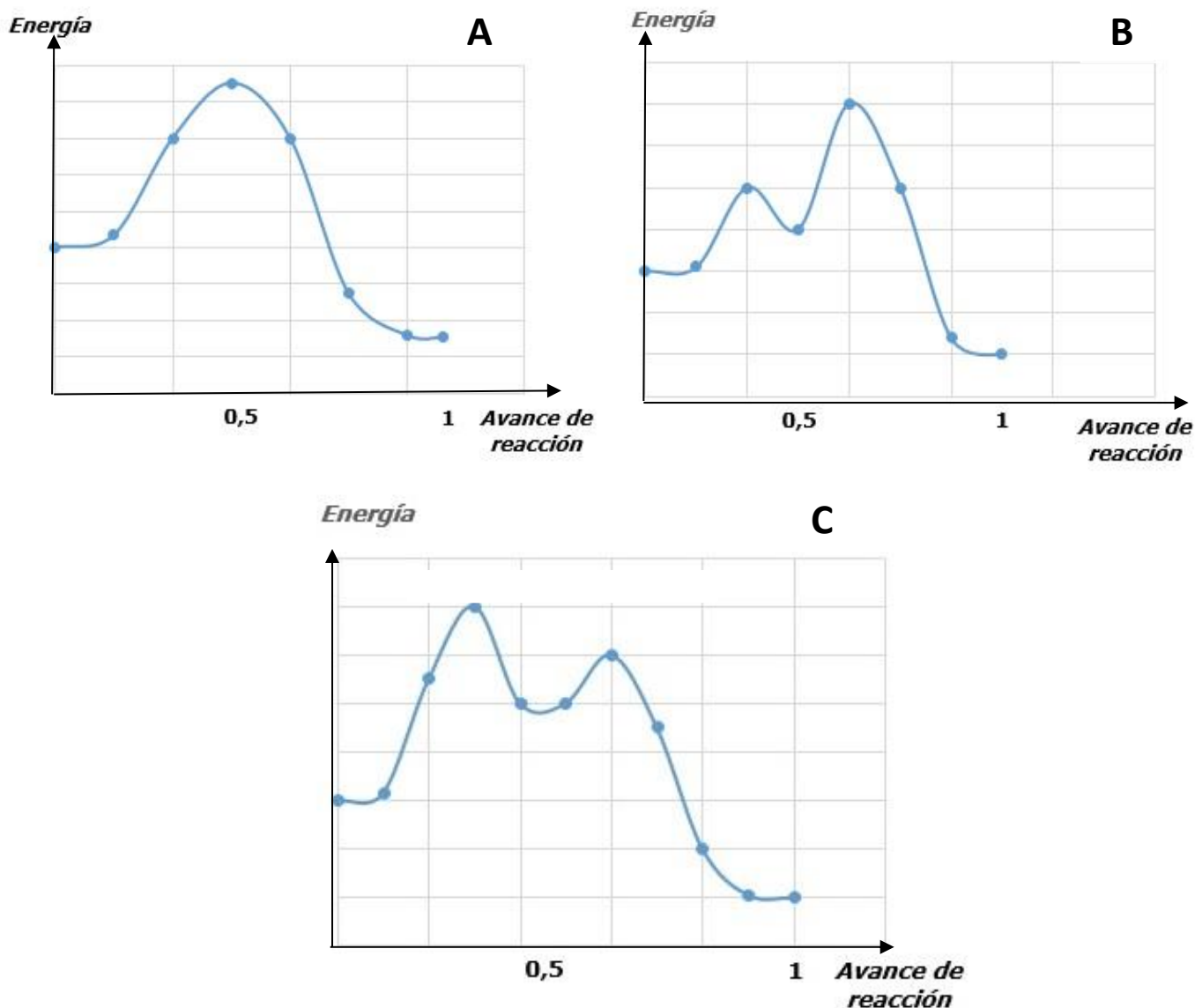


Fig. 2: Diagramas de Energía versus Coordenada de avance reacción

8. ¿Qué estructura resonante elegiría para justificar las reacciones que con sales de diazonio (Morrison & Boyd, 1990) ocurren:
  - a. Con desprendimiento de nitrógeno
  - b. Sin desprendimiento de nitrógeno
9. En las reacciones de las sales de diazonio que ocurren con desprendimiento de nitrógeno con mecanismos S<sub>N</sub>Ar1 (Smith & March, 2007) la carga positiva que se genera sobre el grupo fenilo:
  - a. ¿Se deslocaliza por resonancia? Justifique
  - b. ¿Podrán formarse entonces isómeros de posición si se hace uso de un catión fenil diazonio monosustituido en el anillo? Justifique
10. Considere los siguiente casos:

- a. El 1-bromo-4-nitrobenceno reacciona por S<sub>N</sub>Ar (Streitweiser, 1983) con más facilidad que el 3,5-dimetil-1-bromo-4-nitrobenceno
- b. La diazocoplación (Streitweiser, 1983) con cloruro de benzenodiazonio ocurre menos fácilmente con 2,6-dimetil-N,N-dimetilanilina que con N,N-dimetilanilina

Aplicando el mismo criterio de razonamiento justifique ambos casos, comparando efectos electrónicos y estereoquímicos

Los alumnos seleccionarán dos o tres preguntas y, reunidos en pequeños grupos, discutirán sus posibles respuestas.

Siguiendo a Coll Salvador (1994): "Las situaciones cooperativas son superiores a las individualistas en cuanto al rendimiento y la productividad". La ejecución colectiva de una tarea da lugar a producciones más elaboradas y correctas ya que, el hecho de actuar cooperativamente, "Obliga a todos los miembros del grupo a estructurar mejor sus actividades, explicitarlas, a coordinarlas, sin que la responsabilidad pueda atribuirse en exclusiva a uno de los participantes".

Los docentes suministrarán la literatura pertinente y responderán dudas y consultas. Los alumnos subirán las respuestas a la plataforma de la Universidad para que todo el grupo tenga acceso a ellas. Luego las discutirán en un foro, permitiendo el desarrollo de competencias transversales: comunicación, toma de decisiones, solidaridad, respeto, tolerancia, etc.

Una vez desarrollada esta propuesta pedagógica, se propondrá a los estudiantes, de las comisiones turno mañana y turno noche (aproximadamente 25 cursantes), que respondan una encuesta en carácter de evaluación de esta experiencia educativa en pos de ampliar este proyecto a todas las unidades del programa de contenidos de la materia Química Orgánica II correspondiente a las carreras de Bioquímica y Licenciatura en Ciencias Químicas.

Cabe destacar que este proyecto se encuentra en fase de aplicación por lo que aún no se disponen de resultados concluyentes que demuestren la efectividad de la propuesta en cuestión, y por lo tanto no se incluye un análisis y discusión.

## CONCLUSIÓN

Se considera que la incorporación de estas "preguntas buenas y pertinentes" a la propuesta pedagógica de la cátedra favorecerá el rol activo del estudiante en su aprendizaje, el pensamiento reflexivo, la teorización y la modelización, estimulando el proceso de autoaprendizaje, despertando la curiosidad e incentivando la creatividad.

## REFERENCIAS

Borges, F. (2005). La frustración del estudiante en línea. Causas y acciones preventivas, *Digitum*, 7, 1-8.

Bruice, P.Y. (2007). *Química orgánica* 5ta Edición. Madrid: Prentice Hall.

Cappetta, J.E. & Micheli, C.A. (2019). Ejercitación computacional para estudiar reacciones de sustitución nucleofílica. *Educación Química*, 30 (1), 80-92.

Cappetta, J.E. & Micheli, C.A. (2016). Estudio Computacional de la reactividad comparada de los aniones tioacetato y tiobenzoato frente al bis-(2,4-dinitrofenil)-éter y al bis bis-(2,4-dinitrofenil)-sulfuro. *Revista de la Sociedad Química del Perú*, 82 (2), 114-127.

- Cavassa A.L., Cappetta J. & Micheli C. A. (2017). Comparación de un ataque nucleofílico a un éter versus a un tioéter mediante la metodología computacional Gaussian Hartree-Fock 6-21G. *Revista de Investigaciones Científicas de la Universidad de Morón*, 1 (1), 21-28.
- Carey, F.A. (2014). *Química Orgánica* Novena Edición. México: Mc Grawhill Interamericana.
- Coll Salvador, C. (1994) *Aprendizaje escolar y construcción del conocimiento*. Editorial Paidós. Argentina
- Ege, S. (2008). *Química Orgánica Estructura y Reactividad*. España: Reverté S.A.
- Gadamer, H.G. (2003): *Verdad y método I y II*. Salamanca Edición Sígueme.
- Smith, M.B. & March, J. (2007). *Advanced Organic Chemistry*, Sexta Edición. Wiley
- McMurry, J. (2016). *Química Orgánica Novena Edición*. México: Cengage Learning.
- Morrison, R.T. & Boyd, R.N. (1990). *Química Orgánica*. Quinta edición. Ed. Addison Wesley. Iberoamericana.
- Quintanilla, M., Joglar, C., Labarrere, A., Merino, C., Cuellar, L. & Koponen, I. (2014). *¿Qué piensan los profesores de Química en ejercicio de la resolución de problemas científicos escolares y sobre las competencias del pensamiento científico? Estudios pedagógicos*, 40 (2), 283-302.
- Reig, D. (2013). *Bienvenidos a la Sociedad Aumentada*. Crítica N°985 p. 26-29
- Streitwieser. A. (1983). *Química Orgánica*. Tercera edición. Nueva Edición Interamericana.
- Sykes, P. (1986). *Mecanismos de Reacción en Química Orgánica*. Editorial Reverté, S.A.
- Wade, L.G. (2017). *Química Orgánica*. Novena Edición. México: Pearson Educación