

Compuesto A, de fórmula: $C_5H_{10}O_2$. Actividad óptica, puede reaccionar con HCO_3^- para dar CO_2 .

a) Indicar estructura y nombre de A, con estereoisómeros y configuraciones S y R:

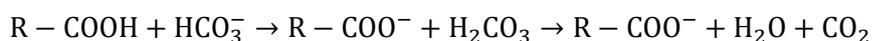
Nº de insaturaciones:

$$I = 1 + C - \frac{H + X - N}{2} = 1 + 5 - \frac{10}{2} = 1 \text{ insaturación}$$

Por lo tanto, A podría ser:

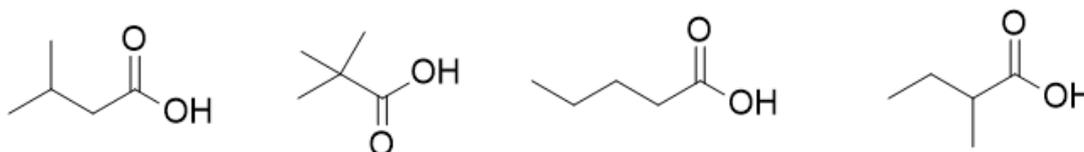
- Un ácido carboxílico
- Una cetona o aldehído + un alcohol/éter
- Un doble enlace + 2 alcoholes/éteres
- Un ciclo + 2 alcoholes/éteres
- Etc.

De estos, solo el ácido carboxílico puede reaccionar con el hidrogenocarbonato:



Así que A debe ser un ácido carboxílico de fórmula $R - COOH$ donde R es C_4H_9 .

Existen diferentes posibilidades:



De las cuales solo la última presenta actividad óptica, por lo que asignamos el compuesto A, que tiene dos isómeros:



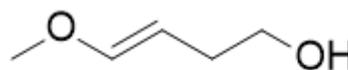
Ácido (R)-2-metilbutanoico

Ácido (S)-2-metilbutanoico

b) Fórmulas semidesarrolladas y nombres de isómeros de cadena y isómeros de función
Los isómeros de cadena son las opciones descartadas en el apartado a). Dos propuestas de isómeros de función son:



5-hydroxipentanal

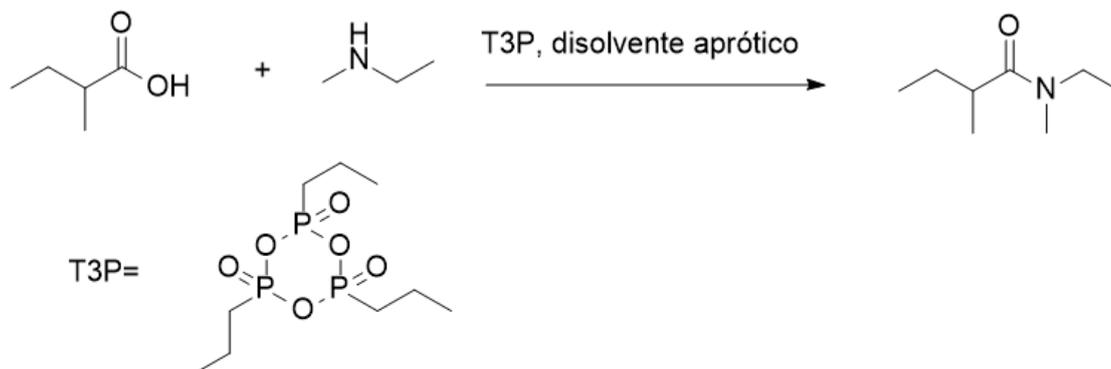


(E)-4-metoxibut-3-en-1-ol

En ciertas condiciones A puede reaccionar con etilmetilamina para dar otro compuesto.

c) Ecuación química de la reacción citada, fórmulas estructurales, nombres de reactivos y productos. Tipo de reacción, y reacción inversa.

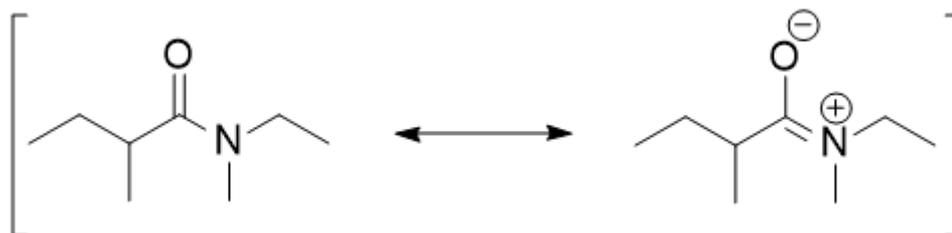
La reacción es una síntesis de amida, o acoplamiento de amida. En general, la reacción está impedida cinéticamente, puesto que en medio básico la amina no puede eliminar un O^{2-} del ácido carboxílico, y en medio ácido la amina se protona y no actúa como nucleófilo. Por eso es habitual utilizar agentes de acoplamiento, normalmente, los cuales interaccionan con el ácido carboxílico para transformar el hidroxilo en un mejor grupo saliente, y permitir el ataque de la amina. Un ejemplo sería el T3P, un anhídrido derivado de ácido fosfórico:



La reacción inversa sería la hidrólisis de una amida, reacción también impedida cinéticamente.

- d) En base a teorías de enlace químico, explicar y justificar hibridación, geometría y polaridad de los productos de la reacción anterior.

Las amidas tienen el siguiente equilibrio de resonancia:



Siempre más desplazado hacia el carbonilo, especialmente en las amidas terciarias por la aparición de cargas formales.

Todos los hidrógenos forman enlaces σ con orbitales s. Los carbonos, todos excepto el del carbonilo, forman enlaces σ con orbitales híbridos sp^3 . El oxígeno, el nitrógeno y el carbono del carbonilo forman enlaces σ con orbitales híbridos sp^2 y enlaces π con orbitales p. La geometría del enlace amida es, por lo tanto, de 120° y plana respecto a los átomos vecinos.

La amida es un enlace bastante polar por las diferencias de electronegatividad entre oxígeno, carbono y nitrógeno, y más en este caso en el que el nitrógeno y el oxígeno tienen cierta carga formal. En este caso puede aceptar enlaces de hidrógeno, pero no donarlos, ya que el nitrógeno no está enlazado a hidrógenos.