La estereoquímica como asignatura complementaria de interrelación

José Luis Pérez-Fillol y Lluís Garrigós Oltra

Institut de Batxillerat "Pare E. Vitoria" Alcoi

1. Introducción: porqué una asignatura denominada, estereoquímica

En el prefacio de su obra "Estereoquímica y su aplicación en Bioquímica" W. L. Alworth (1980) afirma:

"El concepto de que las moléculas de origen biológico pueden ser ópticamente activas se introduce tempranamente en los cursos de química orgánica. El estudiante principiante de bioquímica acepta, por tanto, con facilidad el hecho de que los sistemas biológicos manifiestan estereoespecificidad biológica y diferenciación entre moléculas de sustrato estereoisoméricas."

Pocos estudiantes, sin embargo, que inicien su primer curso de Facultad serán, probablemente, capaces de entender el párrafo precedente.

La estereoquímica, la química desde el punto de vista de la dimensión espacial de las moléculas, se estructura alrededor de un conjunto de conceptos que, en la Enseñanza Media, o más concretamente en C.O.U. aparecen dispersos en distintas asignaturas y en un desorden cronológico que impide que el alumno llegue a aproximarse, siquiera mínimamente, a una valoración real de las cuestiones consideradas.

La difracción y la polarización de las radiaciones electromagnéticas aparecen en los cuestionarios de Física. No obstante son escasas, en los curricula de C.O.U., las relaciones entre estos fenómenos y la geometría molecular –hibridaciones— o la isometría, conceptos que se tratan en Química. Los estudiantes de Biología tienen verdaderos problemas cuando intentan descifrar nombres como D-(+)-Glucosa o α -L-aminoácidos y, sin embargo, es una nomenclatura usual en los primeros días del curso académico.

El manejo de coordenadas cartesianas y polares se describe en Matemáticas, mientras que el Momento de Inercia constituye una cuestión importante dentro de la Dinámica de C.O.U. Es, no obstante, extraño que un alumno de C.O.U. sepa orientar una molé-

cula o calcular su momento de inercia con respecto a su centro de masas o con respecto a un eje de interés.

Aunque la polaridad de enlace se introduce también en Química de C.O.U. es difícil para los alumnos llegar a decidir si una molécula presenta carácter polar o no.

No debe extrañar, pues, que con estos prolegómenos, los enseñantes se planteen reivindicar una introducción ordenada y coherente de los conceptos relacionados con la estereoquímica.

Esta necesidad fue recogida por las autoridades académicas francesas ya en 1983, tratándose tímidamente tales cuestiones en los programas de Première S y Terminal D "à considerer seulement comme une introduction à la Chimie Organique, les notions prèsentées devant être exploitées dans la suite du cours, notamment à l'occasion de l'ètude des acides a-aminés."

Esta actitud, no obstante, fue suficiente para que la estereoquímica despertara interés y preocupación en los enseñantes, apareciendo diversas publicaciones sobre orientaciones metodológicas en su didáctica. (Dufour, 1984; Arnaud, et al., 1984).

Estas guías prácticas se fundamentan en un programa muy abreviado centrado en lo que se denomina estereoquímica estática (definiciones, nomenclatura, ejemplos...). Así, la propuesta de Dufour contempla los siguientes puntos:

- 1.-Introducción.
- 2.-El carbono tetraédrico 2.1. Panorama histórico

- 2.2. Modelos moleculares
- 2.3. Representaciones espaciales de moléculas orgánicas
- 3.-Estereoquímica de conformación
 - 3.1. Etano
 - 3.2. Butano
 - 3.3. Cicloexano
- 4.-Estereoquímica de configuración
 - 4.1. Enantiomería
 - 4.2. Diastereoisomería
 - 4.2.1. Varios átomos de carbono asimétricos
 - 4.2.2. Doble enlace o ciclo
- 5.-Conclusiones.
- 6.-Aplicaciones prácticas.
- 7.-Bibliografía.

La estereoquímica, no obstante, presenta una gran cantidad de aspectos pluridisciplinares, como se ha reseñado al principio de este informe y como ya evidenció Ruhla (1980), por lo que la propuesta de esta materia no debe interpretarse como la imposición de una nueva asignatura a los alumnos, ya suficientemente sobrecargados, sino como un intento de complementar "desde fuera", con unos presupuestos fundamentalmente prácticos, los curricula de Biología, Química y Física utilizando, además, conceptos de Matemáticas y Diseño. En este sentido conviene resaltar lo que apuntan Brand y Fischer (1987): "Stereochemistry is frequently a source of confusion when students are first

exposed to it, and unfourtunately this feeling may linger even after repeated exposure. Visualizing the three dimensional aspects of molecules and their relationships to other molecules is difficult, especially since text books are constrained to a two-dimensional perspective."

De donde es fácil inducir que, una vez superada la etapa de manejo de modelos moleculares y familiarización con la geometría de las moléculas, el ordenador adquiere un papel preponderante en la enseñanza de la estereoquímica, lo que nos conecta directamente con las tendencias más avanzadas de la investigación química (diseño de moléculas y de síntesis químicas) y con la introducción de nuevas tecnologías en la Enseñanza.

Ponderando positivamente todos estos planteamientos, el Seminario de Física y Química del I.B. "Pare E. Vitoria" de Alcoi solicitó, al amparo de la Resolución de 27 de noviembre de 1989 de la Conselleria de Cultura, Educaió i Ciència de la Generalitat Valenciana (DOGV 28-XII-89), la impartición en el curso 90-91 de una nueva EATP, destinada exclusivamente a 3.º de B.U.P., denominada ESTEREO-QUÍMICA, cuyo programa inicial se acompaña en el Anexo al presente trabajo.

La demanda fue en su día estimada favorablemente, si bien a título experimental por lo que ha sido necesario, en cumplimiento de la misma autorización, realizar una valoración de la experiencia y un análisis de los resultados obtenidos hasta la fecha, los cuales se describen a continuación.

2. Análisis y valoración de resultados

a) Metología utilizada.

Un tanteo previo realizado entre los 27 alumnos matriculados en ESTE-REOQUÍMICA como EATP a principios de curso permitió establecer que un 40% de los mismos habían escogido dicha EATP como un "mal menor" dada la oferta del Centro.

Si bien este hecho supuso un "handicap" inicial, no por ello se varió el plan de trabajo diseñado para esta primera experiencia, en el que no se consideraba la realización de exámenes. Por otra parte, los puntos básicos de la metodología a seguir y de los objetivos a conseguir fueron desde un principio explicados a los alumnos.

Durante los cinco primeros meses del curso se abordaron un conjunto de cuestiones que podrían suponer aproximadamente un 60% del programa y que, en todo caso, constituían el núcleo de conceptos de una mayor incidencia en los programas de Química y Biología de C.O.U.

En esta situacióin se procedió durante los primeros días de marzo a la realización de una encuesta, sin previo aviso, encaminada a valorar el nivel de conceptos adquiridos, por lo que para dotar la medición de una mayor fiabilidad y contraste se pasó la misma encuesta, también sin previo aviso, a 121 alumnos de C.O.U. matriculados en las asignaturas de Química y Biología de cinco institutos de la provincia de Alicante:

• I.B. "Pare E. Vitoria" de Alcoi.

- I.B. "Andreu Sempere" de Alcoi.
- I.B. Mixto de Xixona.
- I.B. Mixto de Aspe.
- I.B. "Virgen del Remedio" de Alicante.

La encuesta, cuyo texto se ofrece en el Anexo II al presente trabajo, planteaba 25 cuestiones distribuidas en ocho grupos de conceptos:

- 1.-Simetría (4 items).
- 2.-Hibridación del átomo de carbono (2 items).
- 3.-Geometría molecular (4 items).
- 4.-Propiedades físicas relacionadas con la geometría molecular (3 items).
- 5.-Isomería (3 items).
- 6.-Quiralidad (3 items).
- 7.-Actividad óptica (3 items).
- 8.-Representación molecular (3 items).

Las preguntas se distribuyen aleatoriamente a lo largo de la encuesta con la intención de evitar asociaciones entre items de un mismo grupo, siendo todas ellas de respuesta única dentro de grupos cerrados de opciones en los que, ocasionalmente, se introdujeron "distractores".

b) Análisis de resultados.

Los resultados por preguntas del grupo de prueba (EATP) y del grupo control se exponen en la Tabla 1, tanto en valor absoluto de aciertos, como en porcentaje. A partir de ellos se evaluó una media de aciertos por encuesta en el grupo EATP de 11, mientras que en el grupo C.O.U. dicha media fue de 8.

En la Figura 1 se muestra la representación gráfica de porcentaje de aciertos para cada pregunta en ambos grupos.

En un intento de eliminar la aleatoriedad en las respuestas se confeccionó un segundo sistema de tabulación por grupo de conceptos, admitiendo como respuesta válida por grupo un número de aciertos superior al 50% de items por grupo (más de 3 en los grupos 1 y 3, 2 en el segundo grupo y más de 2 en los restantes).

Los resultados se exponen en la Tabla 2 y su representación gráfica se muestra en la figura 2.

Por sí mismas, las gráficas son suficientemente ilustrativas para evidenciar el mayor porcentaje de aciertos en los alumnos de EATP comparativamente con los de control. Esta diferencia se aprecia notablemente mejor en la gráfica de aciertos por grupo de conceptos a la cual se le supone una menor aleatoriedad en las respuestas.

Con objeto de evidenciar, aún más si cabe, la diferencia entre los resultados de uno y otro grupo, se han elaborado las gráficas de "tendencia de respuesta", construidas mediante un ajuste de mínimos cuadrados entre los distintos valores de porcentaje de aciertos, bien por pregunta, bien por grupo de conceptos, las cuales se muestran en las Figuras 3 y 4.

En ambas se puede constatar una diferencia promedio de 10 puntos como mínimo en porcentaje de aciertos a favor del grupo EATP.

Tabla 1

Distribución de aciertos y porcentaje de los mismos en los grupos EATP y CONTROL

	EATP (27 Alumnos)		CONTROL (121 Alumnos)		
Nº Pregunta	Nº Aciertos	%	Nº Aciertos	%	
1	14 13	52 48	33 46	27 38	
2 3 4 5 6 7	5 10	18 37	25 15	21 12	
5	4 8	15 30	91 41	75 34	
7 8	16 12	59 44	48 23	40 19	
8 9 10	23 7	85 26	59 29	49 24	
11 12	14 9	52 33	28 22	23 18	
13 14	15 11	55 41	82 7	68 6	
15 16	20 3	74 11	58 6	48 5 58	
17 18	15 5	55 18	70 16	58 13	
19 20	19 5	70 18	91 4	75 3	
21 22	18 3	67 11	27 2	75 3 22 2 26 84	
23 24	14 14	52 52	31 102		
25	16	59	53	44	

Promedio de aciertos por alumno en: EATP= 11; CONTROL= 8

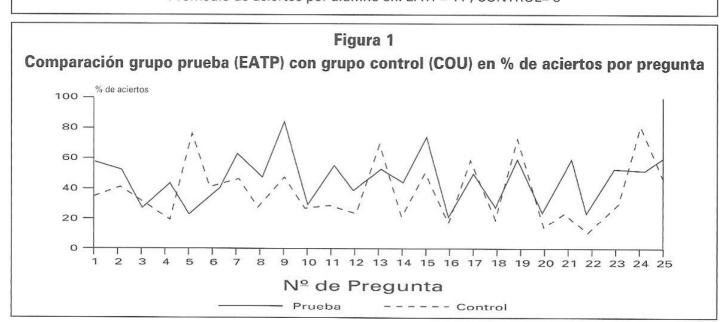
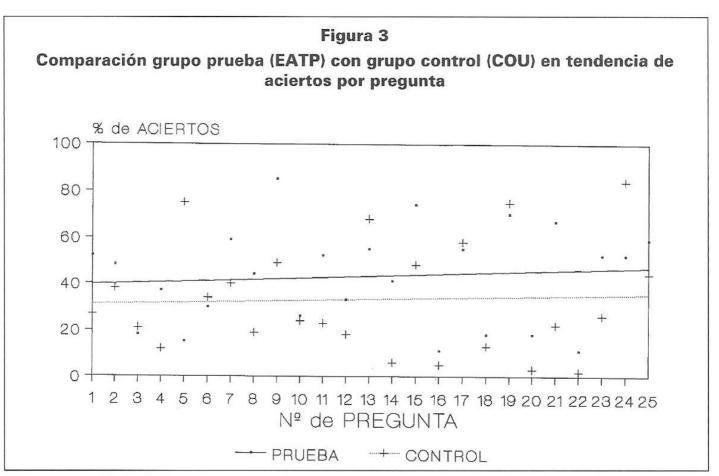


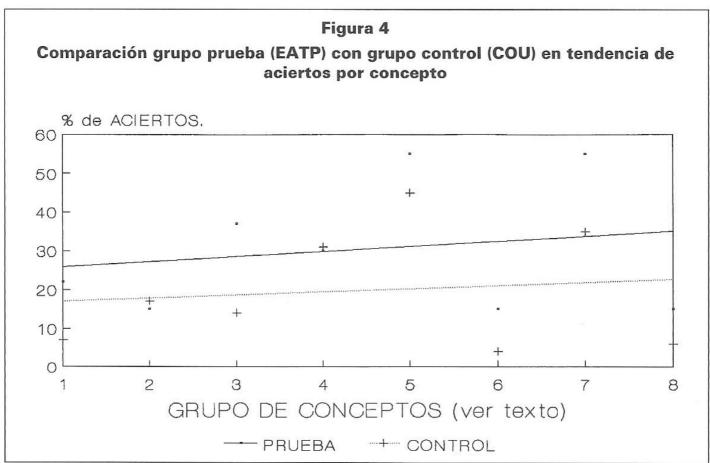
Tabla 2

Distribución de aciertos y porcentajes por grupos de conceptos

		EATP (27 Alumnos)		CONTROL (121 Alumnos)	
CONCEPTOS	CUESTIONES	ACIERTOS	%	ACIERTOS	%
SIMETRIA	1, 3, 12, 15	6	22	8	7
HIBRIDACION	8, 13	4	15	21	17
GEOMETRIA	4, 21, 23, 24	10	37	17	14
PROPIEDADES	2, 7, 10	8	30	38	31
ISOMERIA	6, 9, 17	15	55	55	45
QUIRALIDAD	11, 18, 22	4	15	5	4
ACT. OPTICA	14, 19, 25	15	55	43	35
REP. MOLECU.	5, 16, 20	4	15	7	6

Figura 2 Comparación grupo prueba (EATP) con grupo control (COU) en % de aciertos por concepto % de ACIERTOS 60 50 40 30 20 10 0 3 6 2 8 № de CONCEPTO - PRUEBA ----- CONTROL





3. Conclusiones

De los resultados obtenidos en las encuestas realizadas se puede establecer las siguientes conclusiones:

- 1.—Se precisa una revisión del programa de contenidos inicialmente propuesto con el objeto de adecuarlo al nivel real de los alumnos, para lo cual se requiere una alteración en el orden cronológico expositivo así como una variación en la importancia relativa de unos conceptos con respecto a otros, realzando fundamentalmente aquellos conceptos de un mayor interés práctico en Biología de C.O.U.
- 2.—Aún sin demandar al alumno un esfuerzo excesivo, al haber eliminado controles de conocimiento, el número de conceptos útiles retenidos por los alumnos que han cursado la EATP **ESTEREOQUÍMICA** es superior, al menos, en un 10% a los que posee un alumno normal de C.O.U. matriculado en Química y Biología.
- 3.—Se intuye un enorme potencial didáctico en el uso del ordenador en la enseñanza de la **ESTEREOQUÍ-MICA**, si bien es necesario desechar la idea de que los alumnos son capaces de manejar, con pleno conocimiento de

los hechos, programas avanzados de diseño y representación molecular, más adecuados, indudablemente, a niveles universitarios medio-altos. Por todo ello, urge la preparación de "software" interactivo de diseño molecular adecuado al nivel de conocimientos de un alumno medio de un actual 3.º de B.U.P.

Referencias

- Alworth, W. L. (1980). <u>Estereoquímica</u> <u>y su aplicación en Bioquímica</u>. <u>Alhambra</u> (serie Exedra). Ma-drid.
- Arnaud, P.; Coudert, J.; Le Guilley, L. (1984). La Stereochimie en classes de Première S et Terminal D. Société Française de Chi-mie. Dossiers pour l'enseignement de la Chimie. París.
- Brand, D. J.; Fisher, J. (1987). Molecular Structure and Chirality. J. Chem. Ed. 64 (12), 1035-1038.
- Dufour, Cl. (1984). Stereochimie en Terminal D. Bulletin de l'Union des Physiciens 669, 341-347.
- Ruhla, Cl. (1980). Comment faire de la pluridisciplinarité. Bulletin de l'Union des physiciens, 620, 409-438.

ANEXO I

Programa experimental de la materia ESTEREOQUIMICA

- 1.-Estructura y simetría.
 - 1.1. Identidad y diferencia: Estructuras espaciales.
 - 1.2. Concepto de simetría.
 - 1.3. Disimetría, no disimetría y asimetría.
 - 1.4. Quiralidad.
- 2.-Polarización de la luz.
 - 2.1. Concepto de polarización de la luz.
 - 2.2. Sustancias ópticamente activas.
- 3.-Enlace químico e hibridación.
 - 3.1. ¿Cómo están formados los átomos?
 - 3.2. Estructura atómica.
 - 3.3. Enlace químico. Tipos de enlace. Enlace covalente.
 - 3.4. Hibridación: Concepto.
 - 3.5. Hibridaciones del carbono.
 - 3.6. Hibridaciones de otros átomos.
- 4.-Estructuras moleculares.
 - 4.1. Concepto.
 - 4.2. Representación gráfica de una estructura molecular.
 - 4.2.1. Proyección de Newman.
 - 4.2.2. Proyección de Fischer.
 - 4.2.3. Representación de Haworth.
 - 4.3. Modelos moleculares.
 - 4.3.1. Modelo de varillas y bolas.
 - 4.3.2. Modelo de esqueleto.
 - 4.3.3. Modelo compacto.

- 4.4. Representación gráfica por ordenador.
- 5.-Geometrías moleculares.
 - 5.1. Interés de las geometrías moleculares.
 - 5.2. Difracción de la luz: Determinación de las dimensiones moleculares. Distancias y ángulos de enlace.
 - 5.3. Angulos de torsión.
 - 5.4. Angulos diedros no torsionales.
 - 5.5. Coordenadas cartesianas y coordenadas atómicas internas.
- 6.-Isometría.
 - 6.1. Conceptos y tipos de isomería.
 - 6.1.1. Isomería constitucional y estereoisomería.
 - 6.2. Isomería geométrica.
 - 6.2.1. Denominación Cis-Trans.
 - 6.2.2. Denominación Z-E.
 - 6.3. Isomería óptica.
 - 6.3.1. Carácter levo y destro (1-d).
 - 6.3.2. Nomenclatura L D.
 - 6.3.3. Configuración R S.
 - 6.3.4. Compuestos con más de un carbono asimétrico.
 - 6.3.5. El caso de los azúcares: anomería y epimería.
 - 6.3.6. Actividad óptica de los cicloalcanos.
 - 6.3.7. Moléculas globalmente asimétricas.
 - 6.4. Relación entre n.º de carbonos y n.º de isómeros.

- 7.—Estudio de las conformaciones moleculares.
 - 7.1. Formas eclipsadas y alternadas.
 - 7.2. Carbonos sp3.
 - 7.2.1. Cadenas abiertas.
 - 7.2.2. Cadenas cerradas de 3, 4 y 5 eslabones.
 - 7.2.3. Cadenas cerradas de 6 eslabones.
 - 7.3. Carbonos sp2.
 - 7.3.1. Cadenas abiertas.
 - 7.3.2. Cadenas cerradas.

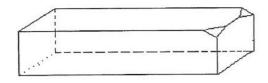
- 7.4. Carbonos sp.
- 7.5. Quiralidad y conformaciones.
- 8.-Energética molecular y estereoquímica.
 - 8.1. Energía y conformacióin molecular.
- 9.—Aspectos biológicos de la estereoquímica.
 - 9.1. La estereoquímica y el origen de la vida.

ANEXO II

Programa experimental de la materia ESTEREOQUIMICA

Texto de la encuesta realizada sobre conceptos adquiridos relacionados con la estereoquímica.

1) El objeto:



presenta los siguientes elementos de simetría:

- (a) Centro
- (b) Plano
- (c) Eje binario
- (d) Ninguno
- 2) Ordena de mayor a menor la estabilidad de los siguientes compuestos:

(I)
$$CH_2$$
 $CH_2 - CH_2$

- (a) I > II > III
- (b) I > III > II

- (d) III > II > I
- (e) III > I > II
- (f) II > I > III
- 3) El compuesto

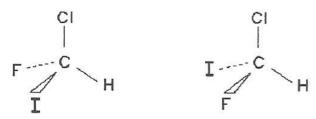
$$C1 \qquad C1$$

tiene los siguientes elementos de simetría:

- (a) Plano
- (b) Centro
- (c) Eje binario
- (d) Ninguno
- 4) La molécula CH₂=CH₂ tiene una estructura:
 - (a) Plana
 - (b) Espacial
 - (c) Lineal
 - (d) Simétrica
- 5) Un amino-ácido es un compuesto orgánico que tiene, al menos, los siguientes grupos:

(e)
$$-NH_2$$
 , $-C=0$

6) Los siguientes compuestos son:



- (a) Iguales
- (b) Estereoisómeros
- (c) Isómeros
- (d) Venenosos
- 7) Cuál de los siguientes compuestos: CH₄; CH₃Cl; CH₂Cl₂; CHCl₃; CCl₄ presenta carácter "eléctrico" o "polar":
 - (a) Todos.
 - (b) Ninguno.
 - (c) CH_4 y CCl_4
 - (d) CH_3Cl , CH_2Cl_2 y $CHCl_3$
 - (e) CH₄, CH₂Cl₂ y CCl₄
- 8) Las hibridaciones de los carbonos sucesivos del compuesto CH3-CH2-CH=CH2 son:
 - (a) $sp^3-sp^2-sp^2-sp^3$
 - (b) $sp^2-sp^3-sp^2-sp^3$
 - $(c) \ \mathrm{sp^3\text{-}sp^3\text{-}sp^2\text{-}sp^2}$
 - (d) No existen hibridaciones del carbono en este caso.

9) ¿Cuántos compuestos distintos hay entre los siguientes?:

$$\begin{array}{c} \operatorname{CH_3-CH_2-CH-CH_2-CH_2-CH_3} \\ | \\ \operatorname{CH_3} \end{array}$$

$$\begin{array}{c} \operatorname{CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH-CH_3} \\ | \\ \operatorname{CH_3} \end{array}$$

- (a) Cuatro
- (b) Ninguno
- (c) Dos
- (d) Tres
- 10) ¿Cuál de los compuestos siguientes:

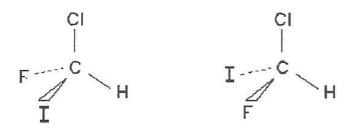
$$\begin{bmatrix} I \end{bmatrix} \qquad H \qquad \qquad H$$

$$C = C$$

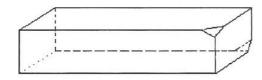
presenta carácter "eléctrico" o "polar":

- (a) Los dos.
- (b) Ninguno.
- (c) [I].
- (d) [II].

11) Los siguientes compuestos son:



- (a) Quirales.
- (b) Superponibles.
- (c) Isótopos.
- (d) Simétricos.
- 12) El objeto:



presenta los siguientes elementos de simetría:

- (a) Centro.
- (b) Plano.
- (c) Eje binario.
- (d) Ninguno.
- 13) Una hibridación sp³ implica una fracción de molécula cuyas características geométricas son de tipo:
 - (a) Plano.
 - (b) Espacial.
 - (c) Lineal.
 - (d) Simétrico.
- 14) Las sustancias ópticamente activas son:
 - (a) Simétricas.
 - (b) Asimétricas.
 - (c) Disimétricas.
 - (d) Quirales.

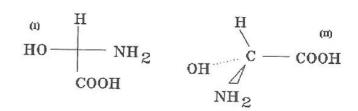
15) ¿Qué objetos son idénticos?

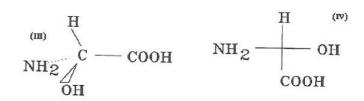






- (a) I V y IV VI.
- (b) I V, II III y IV VI.
- (c) II III.
- (d) I V.
- (e) IV VI.
- (f) II III y IV VI.
- (g) II III y I V.
- 16) ¿Cuáles de la siguients representaciones moleculares son equivalentes?





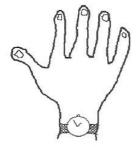
- (a) I IV, II III.
- (b) I II, III IV.
- (c) I III, II IV.
- (d) Todas.
- (e) Ninguna.

17) Los compuestos

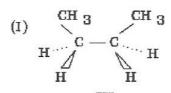
$$C1 \qquad C1 \qquad C1 \qquad H \qquad C1$$

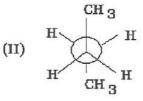
son:

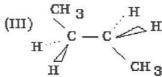
- (a) Isómeros.
- (b) Iguales.
- (c) Isótopos.
- (d) Carbohidratos.
- 18) El siguiente objeto es de tipo:



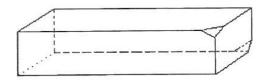
- (a) Disimétrico.
- (b) Asimétrico.
- (c) Quiral.
- (d) Asimétrico y Quiral.
- (e) Simétrico y Quiral.
- (f) Disimétrico y Quiral.
- 19) Una sustancia dextrógira es:
- (a) Opticamente activa a la derecha.
- (b) Comestible.
- (c) Opticamente inactiva a la dere-
- (d) Complementaria de una levógira.
- (e) Bioquímicamente activa.
- 20) Indicar cuáles de las siguientes representaciones son equivalentes:







- (IV) $CH_3 CH_2 CH_2 CH_3$
 - (a) I y II.
 - (b) I y III.
 - (c) II y III.
 - (d) I, II y IV.
 - (e) III y IV.
- 21) En el etano CH₃-CH₃ el ángulo descrito por los átomos H-C-C tiene el valor:
 - (a) 90° .
 - (b) 109º.
 - (c) 120° .
 - (d) 180°.
 - 22) El siguiente objeto es de tipo:



- (a) Disimétrico.
- (b) Asimétrico.
- (c) Quiral.
- (d) Asimétrico y Quiral.
- (e) Simétrico y Quiral.
- (f) Disimétrico y Quiral.

- 23) En el eteno CH_2 = CH_2 el ángulo descrito por los átomos H-C-C tiene el valor:
 - (a) 90° .
 - (b) 109° .
 - (c) 120° .
 - (d) 180° .
- 24) La molécula CH_4 tiene una estructura:
 - (a) Compacta.
 - (b) Lineal.
 - (c) Tetraédrica.
 - (d) Plana.
- 25) ¿Qué sustancias, de las referidas a continuación, son levógiras?:

- (I) α -D-(+)-Glucosa.
- (II) β -D-(+)-Glucosa.
- (III) α -D-(—)-Ramnosa.
- (IV) β -D-(—)Xilosa.
- (V) Acido l-Tartárico.
- (VI) Acido d-Tartárico.
- (VII) L-(+)-Alanina.
- (VIII) L-(—)-Treonina.
- (a) Ninguna.
- (b) I, III.
- (c) II, IV.
- (d) I, II, III, IV, VI.
- (e) V, VII, VIII.
- (f) I, II, VII, VIII.
- (g) III, IV, V, VIII.
- (h) V, VI.
- (i) Todas.