



Estudio de Mecanismos de reacciones orgánicas paradigmáticas

Carga horaria: 10 horas de clase semanales, durante 8 semanas.
Total: 80 horas.

1. Nucleofilia. Mecanismos S_N1 y S_N2 . Mediciones cuantitativas del carácter nucleofílico. Comportamiento comparativo de nucleófilos en fase gaseosa y en solución. Efecto del solvente. Pares iónicos.
2. Carbocationes: carbenios y carbonios. Iones no clásicos. Grupos vecinos participantes (ayuda anquimérica). Efecto salino. Transposiciones. Ejemplos.
3. Sistemas cíclicos. Tensión en cicloalcanos. Reacciones de ciclación. Efecto Thorpe-Ingold. Reglas de Baldwin.
4. Ciclos catalíticos. Reacciones catalizadas por metales. Catálisis en fase homogénea y heterogénea. Metales de transición. Hidrogenación. Hidroformilación. Hidrogenólisis. Reacciones de sustitución. Reacciones de acoplamiento: Heck. Carbonilación. Formación de enlaces C-C y C-X. Reacción de Stille, de Kumada, de Negishi, de Suzuki, de Sonogashira, de Buchwald. Reacción de Tebbe.
5. Reacciones pericíclicas. Reacciones gobernadas por simetría orbital. Cicloadiciones. Reacción de Diels-Alder. Regla de Woodward-Hoffman. Reordenamientos sigmatrópicos. Reacciones electrocíclicas. Reacciones 1,3-dipolares. Reacciones de transferencia de grupo. Reordenamiento de Claisen. Reordenamiento de Cope, oxi-Cope y aza-Cope.
6. Reacciones de transferencia electrónica. Consideraciones teóricas. Evidencias espectroscópicas, electroquímicas y químicas. Reacciones térmicas y fotoinducidas. Modelo de Saveant. Modelo de Marcus y de Rehm-Weller. Efecto del solvente.
7. Intermediarios de reacción. Radicales, carbaniones, carbocationes, aniones y cationes radicales. Algunas técnicas para su determinación. Laser Flash Fotólisis. Electron Spin Resonance (ESR) y Chemical Induced Nuclear Polarization (CIDNP). Quenching de la Emisión Fluorescente. Método de Stern-Volmer.
8. Reacción de $SNR1$. Reacciones fotosensibilizadas. Foto oxidación via transferencia electrónica. Fotosensibilizadores. Fotoalquilación. Sustitución Homolítica Aromática (SHA). Perfluoroalquilaciones. Acoplamiento C-C y C-X. Fotocatálisis. Fotoredox.
9. Métodos para diferenciar mecanismos de reacciones.

Bibliografía:

1. Modern Physical Organic Chemistry, Anslyn E. and Dougherty, D. – University Science Books, 2006
2. Mechanism and Theory in Organic Chemistry, T. H. Lowry and K. S. Richardson, Harper and Row Eds., 3° Ed. 1987.
3. The Art of Writing Reasonable Organic Reaction Mechanisms, R. B. Grossman, 2° Ed., Springer Eds., 1999.
4. The Hammett Equation. Part of Cambridge Texts in Chemistry and Biochemistry. C. D. Johnson, 1980.
5. Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry, Fourth Edition. Edited by Christian Reichardt and Thomas Welton, 2011, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim.


Dra. María Ceria Marino
Directora
Depto. de Química Orgánica



6. Lewis basicity and affinity scales : data and measurement. Christian Laurence, Jean-Francois Gal, 2009, Aptara Inc., New Delhi, India.
7. The organometallic chemistry of the transition metals, Robert H. Crabtree. Sixth edition. 2014, Printed in the United States of America. ISBN: 9781118138076
8. Understanding Organometallic Reaction Mechanisms and Catalysis Computational and Experimental Tools, Valentine P. Ananikov, 2015, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., KGaA, Boschstr. 12, 69469 Weinheim, Germany.
9. Homogeneous Catalysis, Mechanisms and Industrial Applications, SUMIT BHADURI, A John Wiley & Sons Publication. ISBN 0-471-37221-8.
8. Homogeneous Catalysis, Piet W.N.M. van Leeuwen, Kluwer Academic Publishers, P.O. Box 17, 3300 AA Dordrecht, The Netherlands.
10. Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions: Student Edition, Ian Fleming, 2009, John Wiley & Sons, Ltd. ISBN: 978-0-470-74660-8.
11. Natural products synthesis through pericyclic reactions, Giovanni Desimoni, American Chemical Society, Volumen 180, 1983.
12. Pericyclic Reactions, I. Fleming, Oxford Sci. Publ. Eds., 1998.
13. Modern Molecular Photochemistry of Organic Molecules, Nicholas J. Turro; V. Ramamurthy; Juan Scaiano, Editorial: University Science Books, 2010.
14. Photochemistry and Photophysics: Concepts, Research, Applications, V. Balzani, P. Ceroni, A. Juris, 2014. Wiley VCH.
15. Photochemistry of Organic Compounds: From Concepts to Practice., P. Klan; J. Wirz 2009. John Wiley & Sons Ltd, The Atrium, Southern Gate, Chichester, West Sussex, PO19 8SQ, United Kingdom
16. Advanced Organic Chemistry, F. Carey and R. Sundberg, Plenum Press, 1984.
17. Advanced Organic Chemistry, A. March, 5^o Ed., Wiley-Interscience, 2001.
18. Kinetics and Mechanism, 3^o Ed, J. W. Moore and R. G. Pearson, Wiley, 1981.
19. Name reactions, Springer, J. J. Li, 3^o Ed., 2006
20. Advanced Organic Chemistry: Reaction Mechanisms, R. Bruckner, Academic Press, 2001.

Dra. María Carla Marino
Directora
Depto. de Química Orgánica

Estudio de Mecanismos de reacciones orgánicas paradigmáticas



Carga horaria: 10 horas de clase semanales, durante 8 semanas.
Total: 80 horas.

La materia cuenta con una guía de ejercitación o Guía de problemas que aborda los siguientes temas:

SERIE N° 1: Nucleófilos y nucleofilia

SERIE N° 2: Carbocationes y transposiciones

SERIE N° 3: Tensión de anillos y reacciones de ciclación.

SERIE N° 4: Ciclos catalíticos

SERIE N° 5: Reacciones Pericíclicas.

SERIE N° 6: Transferencia Electrónica

SERIE N° 7: Elucidación de Mecanismos de Reacción

Dra. María Carla Marino
Directora
Depto. de Química Orgánica



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Ref. Expte. N° 128/2020

Ciudad Autónoma de Buenos Aires, 20/07/20

VISTO:

La nota presentada por la Dirección del Departamento de Química Orgánica, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado **Estudio de Mecanismos de Reacciones Orgánicas Paradigmáticas** para el año 2020,

CONSIDERANDO:

lo actuado por la Comisión de Doctorado,
lo actuado por la Comisión de Posgrado,
lo actuado por este Cuerpo en la sesión realizada en el día de la fecha,
en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo 113° del Estatuto Universitario,

**EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD
DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
R E S U E L V E:**

ARTÍCULO 1°: Aprobar el curso de posgrado **Estudio de Mecanismos de Reacciones Orgánicas Paradigmáticas** de 80 horas de duración, que será dictado por los Dres. Sergio Mauricio Bonesi y María Laura Uhrig.

ARTÍCULO 2°: Aprobar el programa del curso de posgrado **Estudio de Mecanismos de Reacciones Orgánicas Paradigmáticas** obrante a fs. 3/4 para su dictado en el primer cuatrimestre de 2020.

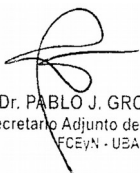
ARTÍCULO 3°: Aprobar un puntaje máximo de tres (3) puntos para la Carrera del Doctorado.

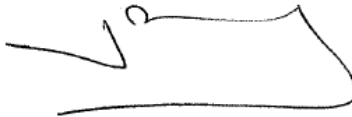
ARTÍCULO 4°: Establecer que si algún estudiante de la carrera de doctorado de la FCEN, solicita asignación de puntaje para su plan de estudios, por este curso y por el curso "Tópicos en la determinación de mecanismos de reacciones orgánicas" solo se le podrá asignar cinco (5) puntos, como máximo, por la suma de ambos cursos.

ARTÍCULO 5°: Disponer que de no mediar modificaciones en el programa y la carga horaria, el presente Curso de Posgrado tendrá una vigencia de cinco (5) años a partir de la fecha de la presente Resolución.

ARTÍCULO 6°: Comuníquese a todos los Departamentos Docentes, a la Dirección de Estudiantes y Graduados, a la Biblioteca de la FCEyN y a la Secretaría de Posgrado con copia del programa incluida. Cumplido, archívese.

RESOLUCIÓN CD N.º 0521


Dr. PABLO J. GROISMAN
Secretario Adjunto de Posgrado
FCEyN - UBA


Dr. JUAN CARLOS REBORADA
DECANO