



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Ref. Expte. N° 127/2020

Ciudad Autónoma de Buenos Aires, 20 de julio de 2020

VISTO:

La nota presentada por la Dirección del Departamento de Química Orgánica, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado **Tópicos en la Determinación de Mecanismos de Reacciones Orgánicas** 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
RESUELVE:**

ARTÍCULO 1°: Aprobar el curso de posgrado **Tópicos en la Determinación de Mecanismos de Reacciones Orgánicas** 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 **Tópicos en la Determinación de Mecanismos de Reacciones Orgánicas** obrante a fs. 3/4 para su dictado en el primer cuatrimestre de 2020.

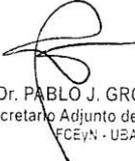
ARTÍCULO 3°: Aprobar un puntaje máximo de tres (3) puntos para la Carrera del Doctorado.

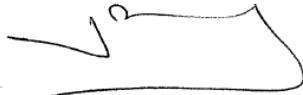
ARTÍCULO 4°: Establecer que si algún estudiante de la carrera de doctorado de la FCEN, solicita asignación de puntaje para su plan de estudios, por este curso y por el curso "Estudio de mecanismos de reacciones orgánicas paradigmáticas" solo se le podrá asignar cinco (5) puntos, como máximo por la suma 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° 0547


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


Dr. JUAN CARLOS REBORADA
DECANO



Tópicos en la determinación de mecanismos de reacciones orgánicas.



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

1. Introducción. Tipos de mecanismos de reacciones orgánicas. Requerimientos termodinámicos y cinéticos de las reacciones orgánicas. Métodos cinéticos. Orden de reacción. Molecularidad. Constante de velocidad. Equilibrios. Termodinámica del estado de transición. Postulado de Hammond.
2. Breve repaso de Teoría de Orbitales Moleculares. Aromaticidad. Efectos orbitales. Efectos estereoelectrónicos. Postulado de Fukui.
3. Ecuación de Arrhenius. Principio de Curtin Hammett. Regla de Cram y relacionadas. Control cinético y termodinámico. Teoría del estado estacionario. Coordenada de reacción. Superficies de energía potencial. Mapas de reacción. Efecto túnel. Teoría del estado de transición. Determinación y detección de intermediarios.
4. Métodos para determinación de mecanismos. Marcación isotópica. Ejemplos. Efecto isotópico primario y secundario. Efecto isotópico del solvente.
5. Acido-base. Teoría de Lewis. Principio "hard-soft". Teoría de Brønsted. Factores que afectan la fuerza de ácidos y bases. Función acidez. pKa en solventes no acuosos. Catálisis ácido-base general y específica. Ley de catálisis de Brønsted.
6. Relaciones extratermodinámicas. Interpretación de los parámetros de activación. Relaciones lineales de energía libre. Efecto de los sustituyentes. Ecuación de Hammett. Modificaciones. Constantes de los sustituyentes: σ_R , σ_I , σ^0 , σ^- , σ^+ , Ecuación de Taft: σ^* . Efecto del Solvente sobre el parámetro ρ . Correlaciones multiparamétricas.
7. Efectos de solvente. Ecuaciones de Kosower, Grunwald-Winstein, Gutman, Dimroth-Reichardt y Taft. Ecuaciones multiparamétricas. Tratamiento de Krygowsky-Fawcett. Ecuaciones de Abboud-Kamlet-Taft. Unión hidrógeno. Solventes HBA y HBD.

Bibliografía:

- Modern Physical Organic Chemistry, Anslyn E. and Dougherty, D. – University Science Books, 2006
- Mechanism and Theory in Organic Chemistry, T. H. Lowry and K. S. Richardson, Harper and Row Eds., 3^o Ed. 1987.
- The Art of Writing Reasonable Organic Reaction Mechanisms, R. B. Grossman, 2^o Ed., Springer Eds., 1999.
- March's Advanced Organic Chemistry Reactions, Mechanisms and Structure 7th Edition - Michael B. S, J. March, 2013.
- Advanced Organic Chemistry, F. Carey and R. Sundberg, Springer, 2007.
- Name reactions, Springer, J. J. Li, 3^o Ed., 2006
- The Investigation of Organic Reactions and Their Mechanisms - Howard Maskill Eds. – 2006
- Advanced Organic Chemistry: Reaction Mechanisms, R. Bruckner, Academic Press, 2001.
- Mechanisms in advanced organic chemistry, Narain, New Age International (P) Ltd., Publishers, 2008
- Strategic Applications of Named Reactions in organic Synthesis, L. Kurti and B. Czabo, Elsevier, Academic Press, 2005.


Dra. María Carla Marino
Directora
Depto. de Química Orgánica



- Reaction Mechanisms In Organic Chemistry, Subrata Sen Gupta, Oxford University Press; 1st edition (2016).
- The Hammett Equation. Part of Cambridge Texts in Chemistry and Biochemistry. C. D. Johnson, 1980.
- Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry, Fourth Edition. Edited by Christian Reichardt and Thomas Welton, 2011, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim.
- Lewis basicity and affinity scales : data and measurement. Christian Laurence, Jean-Francois Gal, 2009, Aptara Inc., New Delhi, India.
- Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions: Student Edition, Ian Fleming, 2009, John Wiley & Sons, Ltd. ISBN: 978-0-470-74660-8.

Dra. María Carla Marino
Directora
Depto. de Química Orgánica

Tópicos en la determinación de mecanismos de reacciones orgánicas.

[REDACTED]

**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: Efecto de la concentración y temperatura sobre las velocidades de reacción.

SERIE N° 2: Estereoquímica y Marcación Isotópica

SERIE N° 3: Efecto Isotópico Cinético

SERIE N° 4: Catálisis y Ley de Brønsted

Serie N° 5: Efectos del sustituyente (Hammett).

Serie N° 6: Efectos del solvente

A large, stylized handwritten signature in blue ink, likely belonging to the Director.

A smaller handwritten signature in blue ink, possibly belonging to a student or another official.

A small handwritten signature in blue ink, corresponding to the typed name below.
Dra. María Carla Marino
Directora
Depto. de Química Orgánica