

1. 90
88

DEPARTAMENTO: Química Orgánica

ASIGNATURA: COMPUTACION EN QUIMICA ORGANICA

CaRRERA: Ciencias Químicas

ORIENTACION:

PLAN:

CARACTER: Optativa

DURACION DE LA MATERIA: 1 cuatrimestree

HORAS DE CLASE: a) Teóricas: 8 hs

b) Problemas: 8 hs

c) Laboratorio: 9 hs

d) Seminarios: — e) Totales: 25 hs

PROGRAMA:

INTRODUCCION

Diversos aspectos de la computación en química. Equipos. Enfoques. Niveles.

CALCULOS

Desarrollo patrimonial de curvas. Tratamientos estadísticos multiparamétricos. Cálculos cinéticos. Cálculos de orbitales moleculares. Diseño gráfico de moléculas orgánicas. Análisis conformacional de moléculas orgánicas.

SINTESIS ORGANICA

Análisis sintético. Dirección Sintética y Antitética. Procesos. Arbol sintético. Gráficos AND/OR. Algoritmos. Metodologías interactivas. Programas multistep y one-step.

Proyectos Hendrickson, OC SS, LHASA, y SOS. Lenguajes. Formas de representar una estructura molecular en memoria unidimensional. Tabla de conexión del LHASA. Percepción y categorización de grupos funcionales. Heurística de Corey. Terminología. Uniones estratégicas

ESPECTROMETRIA DE MASAS Y CGL-EM.

Identificación por "Peak Matching". Métodos "retrieval" o de comparación con biblioteca de espectros. Primeros métodos: comparación de picos abundantes.

Mejoras: selección de picos en todo el rango espectral (Programa MIT); comparación basada en la probabilidad (Programa PBM). Ventajas y desventajas. Aplicaciones.

Interpretación de espectros. Sistemas interpretativos, distintas posibilidades. Reconocimiento de patrones e interacción con sistemas retrieval. Métodos de inteligencia artificial para descubrir reglas de fragmentación (Programa DEN-DRAL). Sistemas interpretativos-retrieval automejorados (STIRS). Ventajas y desventajas. Aplicaciones. Aplicación a CGL-EM. Métodos que optimizan el uso de EM como detector sensible y específico de CGL.

Dra Norma Sudelman

Dr. EDUARDO G. GROS
DIRECTOR Dto. Química Orgánica

Aprobado por Resolución C0810/88

RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR

Sistemas en RMN protónico. Simulación de espectros de sistemas complejos. Métodos dinámicos, análisis de forma de líneas, métodos iterativos (LAOCON). RMN Pulsado, cálculo de secuencias de pulsos.

RMN de ^{13}C . Automatización de la interpretación de espectros. Métodos comparativos, limitaciones. Métodos predictivos (PRED-CHECK; REF-CHECK). Programas interactivos (INTER-CHECK). Aplicaciones

ELUCIDACION DE ESTRUCTURAS

Programas que usan datos de IR, EM y RMN. Elucidación interactiva. (CASE)

BIBLIOGRAFIA

SINTESIS

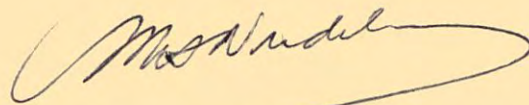
- J.Chem.Inform., Comput.Sci, 22, 8 (1982)
J.Am.Chem.Soc., 98, 189, 203, 210, 222 (1976)
Bull.Soc.Chim.Belg. 91, 333 (1982)
J.Chem.Inform., Comput.Sci., 20, 1 (1980)
Chem. & Eng. News, 7 (1983)

ESPECTROMETRIA DE MASAS

- J. of Chrom.Sci., 22, 125 (1984)
Pure & Appl. Chem., 50, 197 (1978)
Analytical Chem., 56, 373 (1984)
Analytica Chim. Acta, 132, 75 (1981)

RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR

- J. Org. Chem., 47, 1027 (1982)
Org.Magn.Res., 15, 375 (1981)
J.Am.Chem.Soc., 95, 673 (1973)



Doña Nudelman, Norma.



Dr. EDUARDO G. GROS
DIRECTOR Dto. Química Orgánica

MAR 1987