

ASIGNATURA QUIMICA ORGANICA A (Mecanismos de Reacciones Orgánicas)

CARRERA : Lic. Ciencias Químicas  
DURACION : 1 cuatrimestre  
CARACTER : Optativa

ORIENTACION : Química Orgánica  
PLAN : Vigente

HORAS DE CLASE : a) Teóricas : 4 hs.

b) Problemas : 4 hs.

c) Laboratorio :----

d) Seminarios : 2 hs e) Totales : 10 hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Plan vigente hasta 1988, Qca. Orgánica III, Física I, y Qca. Análitica Cuantitativa.

Plan 1989 : Química Orgánica II y Trabajos Prácticos Qca. Análitica Cuantitativa.

Revisión. Métodos para determinar mecanismos. Métodos cinéticos. Orden de reacción. Molecularidad. Constante de velocidad. Equilibrios. Reacciones paralelas. Reacciones consecutivas. Reacciones catalíticas. Control cinético y termodinámico.

Ecuación de Arrhenius. Principio de Curtin Hammett. Teoría del estado estacionario. Coordenada de reacción. Superficies de energía potencial. Mapas de reacción. Efecto tunel. Teoría del estado transición. Determinación y detección de intermediarios. Efecto isotópico, aplicaciones.

Acido base. Teoría de Lewis. Principio de hard-soft. Teoría de Brønsted. Factores que afectan la fuerza de ácidos y bases. Funciones acidez. pKa en solventes no acuosos.

Nucleofilicidad intrínseca. Mediciones cuantitativas del carácter nucleofílico. Reacciones de sustitución nucleofílica en fase gaseosa. Comportamientos comparativos de nucleófilos en fase gaseosa y en solución.

Relaciones extratermodinámicas. Interpretación de los parámetros de activación. Relaciones lineales de energía libre (LFER). Efectos de sustituyentes. Ecuación de Hammett. Modificaciones. Parámetros para efectos inductivos, conjugativos, efecto de campo y estéricos. Sustituyentes iónicos. Efectos de solvente. Parámetros de polaridad-dipolaridad. Ecuaciones: de Kosower, de Grunwald-Winstein, de Gutman, de Dimroth-Reichardt y de Taft. Ecuaciones multiparamétricas. Tratamiento de Krygowsky-Fawcett. Ecuaciones de Abboud-Kamlet-Taft. Unión hidrógeno. Solventes HBA y HBD.

Intermediarios reactivos: radicales libres, carbaniones, carbocationes, carbenos, carbenios, carbonio, bencilo, radicales aniones y radicales cationes. Mecanismos en los que intervienen. Técnicas para su determinación.

Reacciones de transferencia monolectrónica. Consideraciones teóricas. Evidencias espectroscópicas, electroquímicas y químicas. Sondas para diferenciar mecanismos. Nuevos mecanismos de la reacción de Grignard, de Cannizzaro, reacciones de inserción a compuestos organometálicos y reacciones de adición. Reacciones de sustitución electrofílica y nucleofílica aromática. Tratamiento global de mecanismos de reacciones orgánicas.

Universidade  
Federal do Rio de Janeiro  
Instituto de Química

Bibliografia

"Mechanism and Theory in Organic Chemistry", T. H. Lowry and K. S. Richardson, Harper & Row, 3a. ed., 1967.

"Advanced Organic Chemistry", F. Carey and R. Sundberg, 2a. ed., Plenum Press, 1984.

"Advanced Organic Chemistry", A. March, 3a. ed. 1986

"Kinetics & Mechanism", 3a. ed., J. W. Moore & R. G. Pearson, Wiley, 1981.

"Kinetics in Solution" Ch. 4. "From Kinetic data to Reaction Mechanism", Ch. 8. "The use of computers", K. B. Wiberg ch. 13, A. Weissberger, Technique of organic chemistry Vol. VI. Pt 1, Wiley Interscience, 1984.

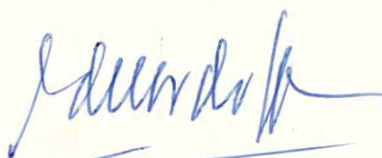
"The Physical Basis of Organic Chemistry" H. Maskill, Oxford University Press, Oxford 1985.

"Correlation analysis in chemistry: Recent advances", eds. N. B. Chapman & J. Shorter, Plenum Press, New York, 1978.

"Nucleophilicity" J. Milton y S. P. Mc Manus., American Chemical Society, Washington D.C. 1987.



Dr. Norma Nudelman



Dr. EDUARDO G. GROS  
DIRECTOR DE QUÍMICA ORGÂNICA