

UNIVERSIDAD NACIONAL DE RÍO CUARTO  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS, FISICOQUÍMICAS Y NATURALES  
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

CARRERA: LICENCIATURA EN QUÍMICA

PLAN DE ESTUDIOS: 2010 v2

ASIGNATURA: Química Orgánica Avanzada  
CÓDIGO:

DOCENTE RESPONSABLE: Dr. Edgardo N. Durantini

CUERPO DOCENTE: Drs. Edgardo N. Durantini, N. Mariano Correa, R. Dario Falcone, Fernando Moyano, Elisa Milanese, Stella Chiacchiera, Marisa Santo, Daniel Heredia, Luciana Fernández

AÑO ACADÉMICO: 2018

RÉGIMEN: cuatrimestral

RÉGIMEN DE CORRELATIVIDADES:

Para cursar		Para rendir
<i>Aprobada</i>	<i>Regular</i>	<i>Aprobada</i>
Química Orgánica II (3810)	Química Orgánica III (2009)	Química Orgánica III (2009)
Física II (3811)	Fisicoquímica II (2016)	Fisicoquímica II (2016)

CARGA HORARIA TOTAL: 112 h (carga horaria semanal: 8 h)

CLASES TEÓRICAS: 4 h      CLASES PRÁCTICAS: 4 h

CARÁCTER DE LA ASIGNATURA: optativa

CONDICIÓN: régimen promocional

## **A) CONTEXTUALIZACIÓN DE LA ASIGNATURA**

En el contexto del plan integral de formación de los alumnos de la Licenciatura en Química, la química orgánica ocupa un espacio preponderante en la formación del profesional, debido a la importancia que esta área del conocimiento tiene en las ciencias y tecnologías actuales. La formación gradual del estudiante en esta área comienza con Química Orgánica I, II y III. La finalidad de esta Química Orgánica Avanzada es completar y ampliar la formación adquirida por los alumnos en química orgánica con nuevos contenidos de mayor especificidad y nivel en este campo del conocimiento.

## **B) OBJETIVOS PROPUESTOS**

- Comprender las interacciones moleculares, el efecto solvatocrómico y los efectos de solventes.
- Estudiar las propiedades y reacciones de compuestos organometálicos.
- Planear alternativas de síntesis mediante química combinatoria y química click.
- Investigar los mecanismos de reacciones orgánicas mediante tratamientos cinéticos.
- Estudiar la síntesis, propiedades y aplicaciones de macromoléculas dendríticas.

## **C) CONTENIDOS BÁSICOS DEL PROGRAMA A DESARROLLAR**

Interacciones moleculares, el efecto solvatocrómico y los efectos de solventes sobre espectros de absorción y emisión. Parámetros de solventes y ecuaciones multiparamétricas. Propiedades y reacciones de compuestos organometálicos. Química combinatoria y química click. Mecanismos de reacciones orgánicas mediante tratamientos cinéticos. Síntesis, propiedades y aplicaciones de macromoléculas dendríticas.

## **D) FUNDAMENTACIÓN DE LOS CONTENIDO**

Los temas desarrollados en las unidades I-III permitirán comprender las interacciones moleculares e interpretar la química supramolecular. Además, analizar el solvatocromismo de acuerdo a las interacciones específicas soluto-solvente y estudiar el efecto de los solventes mediante parámetros multivariados usando medidas espectroscópicas. En el tema IV se desarrolla el estudio de mecanismos de reacción, mediante interpretación cinética y efecto de solvente. El tema V extiende los conocimientos de síntesis adquiridos en las químicas orgánicas previas a las reacciones de organometálicos. Los temas VI y VII utilizan las herramientas de la síntesis orgánica para aplicarlas en química combinatoria y química click. La últimas tres unidades (VIII-X) introducen las propiedades de las moléculas dendriméricas, la síntesis de dendrímeros y sus aplicaciones como nanoestructuras.

## **E) ACTIVIDADES A DESARROLLAR**

**CLASES TEÓRICAS:** 4 horas semanales, donde se exponen los distintos temas con la exposición teórica del profesor y resolución de problemas. Se intenta promover la discusión e intervención activa de los alumnos de los diferentes los aspectos de la teoría sobre la base de problemas concretos.

**CLASES PRÁCTICAS:** 4 horas semanales, donde se hacen los planteos experimentales de lo discutido en la actividad teórico- prácticas.

## **F) NÓMINA DE TRABAJOS PRÁCTICOS**

1. Interacciones moleculares
2. Solvatocromismo
3. Estudio del efecto de solventes en la absorción y emisión de una anilina
4. Estudio del mecanismo de la sustitución nucleofílica aromática
5. Utilización de compuestos organometálicos en síntesis
6. Estrategias de síntesis basadas en química combinatoria
7. Reacción utilizadas en química click
8. Macromoléculas dendriméricas
9. Aplicaciones de estructuras dendriméricas

## **G) HORARIOS DE CLASES**

CLASES TEÓRICAS: martes de 8:00-12:00 h.

CLASES PRÁCTICAS: jueves 8:00-12:00 h.

HORARIO DE CLASES DE CONSULTAS: lunes 14:00-16:00 h.

## **H) MODALIDAD DE EVALUACIÓN**

CONDICIONES DE REGULARIDAD:

Para lograr la regularidad los estudiantes deberán cumplir con los siguientes requisitos:

- Complimentar las actividades clases teóricas y prácticos con un 80% de asistencia.
- Aprobar tres exámenes parciales en primera instancia. El estudiante tendrá derecho a una instancia de recuperación para cada evaluación que acredite sus conocimientos de la asignatura.

CONDICIONES DE PROMOCIÓN:

Obtención de una calificación promedio de siete puntos (sin registrar instancias evaluativas de aprobaciones con notas inferiores a seis puntos) entre los tres exámenes parciales de la asignatura. El tercer parcial en el sistema de promoción incluirá actividades de integración. El estudiante tendrá derecho a una instancia de recuperación para la promoción.

EVALUACIÓN FINAL:

La evaluación final se realizará mediante un examen integrador de los contenidos de la asignatura.

## PROGRAMA ANALÍTICO

### A) CONTENIDOS

#### **TEMA I. Interacciones moleculares**

Fuerzas intermoleculares débiles. Definición y ejemplos. Ion-dipolo, dipolo-dipolo, dipolo-dipolo inducido, dipolo instantáneo-dipolo inducido. Puente hidrógeno. Interacciones solvofóbicas. Rol de las interacciones moleculares débiles en la Química Supramolecular, en el reconocimiento molecular y en las máquinas moleculares.

#### **TEMA II. Solvatocromismo**

Solvatación. Solvatación preferencial. Clasificación del solvente de acuerdo a: constitución química, constantes físicas, comportamiento ácido-base, interacciones específicas soluto-solvente. Efecto de solvente sobre espectro de absorción y emisión.

#### **TEMA III. Efecto de Solvente**

Clasificación de solvente usando parámetros multivariados. Parámetros empíricos para polaridad de solventes-relación energía libre de Gibbs. Parámetros empíricos de polaridad usando medidas espectroscópicas. Ecuaciones multiparamétricas (Kamlet-Taft).

#### **TEMA IV. Mecanismo de reacción**

Estudio de mecanismos de reacción. Herramientas para la determinación de mecanismos. Cinética de las reacciones en solución. Casos límites: Reacciones controladas por Difusión o por activación. Catálisis. Efecto del solvente. Aplicación al estudio del mecanismo de las reacciones de sustitución nucleofílica aromática.

#### **TEMA V. Organometálicos**

Enlace carbono-metal. Reactivos organometálicos de los grupos I y II. Reacciones con zinc y cobre. Reactivos organometálicos de metales de transición. Regla de los 18 electrones y estado formal de oxidación. Mecanismo de las reacciones organometálicas. Reacciones de organopaldio. Reacciones de Stille, Suzuki, Heck y Sonogashira. Aplicaciones en la síntesis orgánica.

#### **TEMA VI. Química combinatoria**

Principios básicos e importancia. Estrategias de síntesis. Síntesis en conjunto y en paralelo. Síntesis en fase sólida. Química combinatoria dinámica. Aplicaciones de la química combinatoria.

#### **TEMA VII. Química click**

Introducción a la química click. Tipos de reacciones click: reacciones de apertura nucleofílica de anillos, reacciones de grupos protegidos y reacciones de cicloadición. Mecanismos de las reacciones click. Aplicaciones de química click en macromoléculas: síntesis de polímeros, química de soporte sólido y aplicaciones biológicas.

#### **TEMA VIII. Macromoléculas dendríticas**

Dendrimeros. Dendrones. Polímeros dendriméricos hiperramificados. Polímeros híbridos (Arborescentes, dibloque, tribloque, estrella). Megámeros. Propiedades que diferencian los polímeros clásicos de los polímeros dendríticos.

### TEMA IX. Síntesis de dendrímeros

Método divergente. Método convergente. Ventajas y limitaciones. Síntesis de dendrímeros asimétricos. Funcionalización y modificación periférica de moléculas dendríméricas.

### Tema X. Nanoestructuras dendriméricas

Elucidación estructural y caracterización. Aplicación de diferentes técnicas. Espectroscopia IR, UV, resonancia magnética nuclear y fluorescencia. Cromatografía de exclusión por tamaño. Microscopía de fuerza atómica. Técnicas de dispersión. Caracterización de microentornos dendriméricos mediante asociación física de moléculas sonda. Propiedades y aplicaciones de macromoléculas dendríticas

## B) CRONOGRAMA

Mes	Días	Clases Teórico-prácticas	Trabajos Prácticos
Marzo	19-23	Tema I. Interacciones moleculares	1
	26-30	Tema II. Solvatocromismo	2
Abril	2-6	Tema III. Efecto de Solvente	3
	9-13	Tema IV. Mecanismo de reacción	4
	16-20	Integración y repaso Temas I-III <b>Primer parcial</b>	
	23-27	Tema IV. Organometalico	5
Mayo	30-04	Tema V. Química combinatoria	6
	7-11	Tema VI. Química click	7
	14-18	Integración y repaso de los Temas IV-VI <b>Segundo parcial</b>	
	21-25	Tema VIII. Macromoléculas dendríticas	8
Junio	28-01	Tema IX. Síntesis de dendrímeros	9
	4-8	Tema X. Nanoestructuras dendriméricas	
	11-15	Integración y repaso Temas <b>3er parcial</b>	
	18-22	Recuperatorios	

## C) BIBLIOGRAFÍA

- C. Reichardt, Solvents and solvents effects in organic chemistry. Segunda Edición, VCH, Alemania, 1988.
- N. Isaacs, Physical organic chemistry. Segunda Edición. Longman. Inglaterra. 1995.
- J. R. Lakowicz, Principles of fluorescence spectroscopy. Segunda Edición, Kluwer Academic, Boston, 1999.

- T. H. Lowry, K. S. Richardson, Mechanism and theory in organic chemistry. Tercera Edición, Harper & Row, Nueva York, 1987.
- Omar A. El Seoud, Wilhelm J. Baader, E. L. Bastos, Chapter 20, Practical chemical kinetics in solution encyclopedia of physical organic chemistry, first edition. Edited by Z. Wang, John Wiley & Sons, 2016.
- M. Małosza Nucleophilic aromatic substitution, general corrected mechanism and versatile synthetic tool. Org. Med. Chem. IJ.; 2, 555-576, 2017
- F. Terrier, Modern nucleophilic aromatic substitution, Wiley VCH, Weinheim, 2013.
- A. Carey, R. J. Sundberg, Advanced organic chemistry, Part B: reactions and synthesis. 5<sup>o</sup> Edición, Springer, 2007.
- J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, Organic chemistry. 2<sup>a</sup> Edición, Oxford University Press, 2012.
- M. Schlosser, Organometallics in synthesis. 2da Ed. John Wiley & Sons, 2002.
- C. Elschenbroich, A. Salzer, Organometallics. 2da Ed. VCH. 1992.
- E.G. Mata, Química combinatoria: una nueva era en el descubrimiento de medicamentos, Ciencia Hoy, 7, 40: 10-18. 1997.
- R. Furlán, G. Labadie, S. Pellegrine, V. L. Ponzó, Química combinatoria: estrategias para la generación de diversidad molecular, Química Nova, 19, 4: 411-422, 1996.
- J. C. H. M. Wijkmans, R. P. Beckett, Combinatorial chemistry reviews. DDT, 7, 126, 2002.
- P. Thirumurugan, D. Matosiuk, K. Jozwiak, Click chemistry for drug development and diverse chemical–biology applications, Chem. Rev. 113, 4905–4979, 2013.
- A. Tabacaru, B. Furdui, I. O. Ghinea, G. Cârâc, R. M. Dinica, Recent advances in click chemistry reactions mediated by transition metal based systems, Inorgan. Chim. Acta 455, 329-349, 2017.
- J. M. J. Fréchet, D. Tomalia (Eds) Dendrimers and other dendritic polymers, Wiley & Sons, 2001.
- D. Tomalia, The dendritic state. Materialstoday 34-46, 2005.
- S. Undre, S. Pandya, V. Kumar, M. Singh Dendrimers as smart materials for developing the various applications in the field of biomedical sciences. Adv. Mater. Lett. 7, 502-516, 2016.