Ministerio de Cultura y Educación **(Programa del año 2021)**
Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Química Bioquímica y Farmacia
Departamento: Quimica
Area: Qca Organica

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
FISICOQUIMICA ORGANICA	LIC.EN FISICA	015/06	2021	2° cuatrimestre

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
PUNGITORE, CARLOS RODOLFO	Prof. Responsable	P.Asoc Exc	40 Hs
CIFUENTE, DIEGO ALBERTO	Prof. Colaborador	P.Asoc Exc	40 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	**Teóricas**	**Prácticas de Aula**	**Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.**	**Total**
6 Hs	Hs	2 Hs	Hs	8 Hs

Tipificación	Periodo
C - Teoria con prácticas de aula	2º Cuatrimestre

Duración			
Desde	**Hasta**	**Cantidad de Semanas**	**Cantidad de Horas**
23/08/2021	26/11/2021	14	112

IV - Fundamentación

El estudio de la Química Orgánica desde el punto de vista fisicoquímico ofrece la posibilidad de profundizar en las áreas de conocimiento comunes entre la Física y la Química, y en la aplicación de la primera en la comprensión de la relación entre la estructura de los compuestos y sus propiedades tanto físicas como químicas. La vinculación con las propiedades físicas se evidencia en el estudio de técnicas espectroscópicas de identificación. Este punto de vista también permite explicar y predecir el mecanismo de un gran número de reacciones que se producen entre compuestos orgánicos.

V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

Se pretende que al final del curso los estudiantes comprendan la relación entre la estructura de un compuesto químico – descripto desde las diversas teorías sobre la estructura de los átomos y la naturaleza de los enlaces químicos – y sus propiedades físicas y químicas. Asimismo se pretende dar una idea de la aplicación de conceptos fisicoquímicos básicos a la interpretación de los mecanismos de reacción mas habituales entre las reacciones que se producen entre compuestos orgánicos.

VI - Contenidos

TEMA N°1.- ESTRUCTURA ELECTRONICA, ENLACES Y PROPIEDADES

Revisión de teorías del enlace químico. Enlace en moléculas orgánicas. Enlace covalente. Geometría molecular. Moléculas polares y no polares. Carga formal. Teoría de la resonancia: postulados y condiciones. Orbitales atómicos y moleculares. Estructura y propiedades físicas. Hidrocarburos: generalidades, enlaces simples y múltiples. Carbocationes: formación y

estabilidades relativas. Sistemas conjugados. Efectos derivados de desplazamientos electrónicos: características -
TEMA N° 2.- LAS MOLECULAS ORGANICAS Y SUS REACCIONES
Grupos funcionales y series homólogas, presentación. Nomenclatura. Introducción a los distintos tipos de reacciones. Equilibrios, cinética, mecanismos y perfiles de reacción. Postulado de Hammond. Ácidos y bases. Reacciones en medio acuoso y no acuoso.-
TEMA N° 3.- ALCANOS Y CICLOALCANOS I: ISOMERIA Y ANALISIS CONFORMACIONAL
Confórmeros e isómeros: concepto. Isomería: distintos tipos. Análisis conformacional de etano y n-butano. Estructura de cicloalcanos, análisis conformacional. Cicloalcanos bisustituidos, isomería, análisis conformacional. Compuestos bicíclicos, configuraciones y conformaciones en el sistema decalina.
TEMA N° 4.- ESTEREOISOMERIA
Quiralidad. Actividad óptica y enantiómeros. Configuración R,S. Racematos. Compuestos con más de un centro quiral, diasteroisómeros. Estereoisomería en compuestos cíclicos. Reacciones químicas y estereoisomería. Resolución de mezclas racémicas por métodos cinéticos y biológicos. Isomería en olefinas, nomenclatura E, Z. Determinación de sistemas homotópicos, enantiotópicos y diasterotópicos; propiedades físicas y químicas asociadas.
TEMA N° 5.- BENCENO Y AROMATICIDAD
El benceno: estructura, modelo de Kekulé; propiedades asociadas al carácter aromático, resonancia. Descripción de benceno según Teoría de Orbitales Moleculares. Regla de Hückel: bases electrónicas. Iones aromáticos. Compuestos aromáticos bencenoides y no bencenoides. Hidrocarburos aromáticos polinucleares. Arenos. Carbocationes y radicales bencílicos, estabilidad, reactividad.
TEMA 6.- ESPECTROSCOPÍA de ULTRAVIOLETA y VISIBLE:
Generalidades. Transiciones electrónicas. Leyes de Lambert y Beer. Aplicaciones a compuestos orgánicos.
TEMA 7.- ESPECTROSCOPÍA DE INFRARROJO. Generalidades. Modos normales de vibración. El espectro rotacional - vibracional. Absorción y momento dipolar. Frecuencias de grupo. Aplicaciones generales en compuestos orgánicos. Generalizaciones. Influencias de efectos inductivos y mesómeros. Análisis espectral de IR. Problemas de aplicación.
TEMA 8.- ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE HIDROGENO1.
El fenómeno de RMN. Corrimiento químico. Aplicaciones en compuestos orgánicos. Interacciones espín - espín. Aplicaciones en compuestos orgánicos. Obtención de los valores de corrimientos y constantes de acoplamiento. Manejo de tablas y bibliografía de RMN.Problemas combinados con información química. ESPECTROSCOPÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE CARBONO13. Generalidades. Desacoplamientos parciales y totales. Desacoplamiento. Aplicaciones. Aplicaciones sobre compuestos orgánicos. Manejo de tablas. Problemas combinados con otras técnicas espectrométricas.
TEMA 9.- ESPECTROSCOPÍA DE MASAS.
Fundamentos y ecuaciones básicas. Generalidades. Iones moleculares, fragmentos isotópicos. Abundancias. Análisis de trazas. Técnicas de determinación y su composición por estudios isotópicos de alta resolución. Uso combinado de información en EM, RMN, e IR en el análisis de muestras orgánicas. Fragmentaciones y reordenamientos en EM de compuestos orgánicos. Generalidades.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

Trabajos Prácticos de Aula
Los mismos consisten en la resolución de ejercicios y problemas relacionados con el desarrollo teórico de la asignatura.

VIII - Regimen de Aprobación

1. La materia consta de un régimen promocional sin examen final.
2. Se toman 2 (dos) evaluaciones parciales teórico - prácticas que se califican en una escala de 0 a 10:
1er parcial: Temas 1- 5
2do parcial: Temas 6 – 9
3. Para promocionar la materia se requiere una puntuación mínima de 7 (siete) puntos en cada uno de los parciales.
4. Para aprobar los parciales se requiere una puntuación mínima de 4 (cuatro) puntos.
5. Los alumnos disponen de 2 recuperaciones por cada parcial, según reglamentación
6. Las clases teórico - prácticas son obligatorias. Se requiere para su aprobación una asistencia mínima del 80%.
7. Los alumnos que no acceden a la promoción de la materia deben aprobarla por examen final.
8. Puede rendirse la materia en forma libre. El examen libre consta de una parte escrita con preguntas sobre temas de

Prácticos y de un Examen Oral sobre dos temas elegidos por sorteo entre los temas del programa.

IX - Bibliografía Básica

[1] Mc Murry J. ; Química Organica, 7a. Ed. Australia, Mexico, Cengage Learning, 2008
[2] Mc Murry J. ; Química Organica, 5a. Ed. International Thomson Editores, 2001.
[3] Vollhardt, K.P.C. y Schore N.E., Química Orgánica. Estructura y función; Ed. Omega, 2008
[4] Página 3
[5] Vollhardt, K.P.C. y Schore N.E., Química Orgánica. Estructura y función; Ed. Omega, 2000
[6] Solomons G. T. W. ; Química Orgánica, Ed. Limusa.Noriega, 1985.
[7] Morrison y Boyd; Química Orgánica, 5 Ed. Addison, Wesley & Longman, 1998..-
[8] Streitwieser A. y Heathcock C. H. ; Química Orgánica, 3er. Ed. , Interamericana Mc. Graw Hill, 1989.-
[9] Loudon, M.G.; Organic Chemistry, Benjamin-Cummings Pub Co, 1988
[10] Silverstein,R.C, Bassler, G.C y Morril, T.C.; Identificación espectrométrica de Compuestos Orgánicos; Ed. Diana, México, 1981

X - Bibliografia Complementaria

[1] March; Advanced Organic Chemistry; 5º Ed.,J. Wiley and Sons, 2001
[2] Carey, F.A. & Sundberg, R.J.; Advanced Organic Chemistry, 4° Ed., Plenum Press, 2000.
[3] Sykes P. ; Mecanismos de Reacción en Química Orgánica; Ed. Reverté, Primera, 1985.
[4] Gillespie, R.J. & Popelier, P.L.A., Chemical bonding and molecular geometry, Oxford University Press, 2001
[5] HESSE, MEIER & ZEEH, Métodos espectroscópicos en Química Orgánica; Ed. Sintesis; 1999
[6] PASTO-JOHNSON; Organic Structure Determination; Prentice Hall.-
[7] DYER; Aplications of Absorption Spectroscopy of Organic Compounds; Prentice Hall.-
[8] SILVERSTEIN-BASSLER; Spectrometric Identification of Organic Compounds; J.Wiley, 1994.-
[9] SEIBL J.; Espectrometría de Masas; Ed. Alhambra, 1973.-

XI - Resumen de Objetivos

Los alumnos deberán manejar, al final del curso, los conceptos básicos sobre: Estructura electrónica, enlace y propiedades. Las moléculas orgánicas y sus reacciones. Alcanos y cicloalcanos. Estereoisomería. Introducción a métodos espectroscópicos y espectrométricos a la identificación de compuestos orgánicos. UV-Visible, IR, RMN y EM.

XII - Resumen del Programa

Programa: resumen
A) Temas
TEMA N° 1.- ESTRUCTURA ELECTRONICA, ENLACES Y PROPIEDADES
TEMA N° 2.- LAS MOLECULAS ORGANICAS Y SUS REACCIONES
TEMA N° 3.- ALCANOS Y CICLOALCANOS I: ISOMERIA Y ANALISIS CONFORMACIONAL
TEMA N° 4.- ESTEREOISOMERIA
TEMA N° 5.- BENCENO Y AROMATICIDAD
TEMA N° 6.- ESPECTROSCOPIA UV – VISIBLE
TEMA N° 7.- ESPECTROSCOPIA INFRARROJO
TEMA N° 8:.- ESPECTROSCOPIA DE RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR
TEMA N° 9.- ESPECTROMETRIA DE MASAS

XIII - Imprevistos

El presente programa puede presentar ajustes dada la situación epidemiológica por COVID-19. Toda modificación será acordada y comunicada con el estudiantado e informada a Secretaría Académica.

XIV - Otros