

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR BAHIA BLANCA ARGENTINA						1/4
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA						
PROGRAMA DE: ESTRUCTURA y MECANISMOS EN QUÍMICA ORGÁNICA					CÓDIGO: 6110	
					AREA NRº: II	
H O R A S D E C L A S E					P R O F E S O R / A R E S P O N S A B L E	
T E Ó R I C A S			P R Á C T I C A S		Dra. Ana Paula Murray	
Por semana	Por cuatrimestre	Por semana	Por cuatrimestre			
4	60	3	44			
A S I G N A T U R A S C O R R E L A T I V A S					P R E C E D E N T E S	
A P R O B A D A S					C U R S A D A S	
DETERMINACIÓN DE ESTRUCTURAS ORGÁNICAS POR MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS (para rendir)					DETERMINACIÓN DE ESTRUCTURAS ORGÁNICAS POR MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS (para cursar)	
DESCRIPCION La asignatura provee una formación avanzada en química orgánica, articulando de manera sistemática los fundamentos teóricos del enlace químico y la reactividad molecular con su aplicación al análisis mecanístico de las transformaciones orgánicas más relevantes. A partir de los modelos cualitativos y cuantitativos de la estructura electrónica – teoría de enlaces de valencia, orbitales moleculares, teoría de perturbación y orbitales frontera – el curso desarrolla las herramientas conceptuales necesarias para comprender y predecir el comportamiento químico de moléculas orgánicas en distintos entornos. Se abordan las interacciones intermoleculares y los efectos del solvente como variables determinantes de la reactividad, y se integra el análisis termodinámico y cinético mediante relaciones lineales de energía libre. El programa culmina con el estudio de las reacciones pericíclicas – electrocíclicas, sigmatrópicas y cicloadiciones – cuyo tratamiento mediante la teoría de orbitales frontera y las reglas de Woodward-Hoffmann sintetiza y consolida los conceptos desarrollados a lo largo de toda la asignatura.						
OBJETIVOS El objetivo central es que el estudiante sea capaz de interpretar, postular y fundamentar mecanismos de reacción en los principales tipos de procesos orgánicos – sustituciones nucleofílicas y electrofílicas, eliminaciones, adiciones, reacciones radicalarias y pericíclicas – con un nivel de rigor propio de la química orgánica avanzada. Se espera que el estudiante integre los conceptos de estructura, estereoquímica, reactividad y efectos del medio en un marco analítico unificado, adquiriendo además competencias básicas en la predicción de propiedades moleculares.						
PROGRAMA SINTÉTICO <u>Tema 1: ESTRUCTURA DE MOLÉCULAS ORGÁNICAS.</u> Teoría de enlaces de valencia. Teoría de orbitales moleculares. <u>Tema 2: INTERACCIONES INTERMOLECULARES.</u> Interacciones específicas y no-específicas. Solvatación y reactividad química. <u>Tema 3: RELACIONES ESTRUCTURA-REACTIVIDAD.</u> Acidez y basicidad. Nucleofilia y electrofilia. <u>Tema 4: MECANISMOS DE REACCIONES ORGÁNICAS.</u> Estudio y descripción de mecanismos de reacciones orgánicas. <u>Tema 5: REACCIONES POLARES EN MEDIO BASICO.</u> Sustitución nucleofílica alifática y aromática. Eliminaciones. Adición de Michael. Reacciones del carbonilo. <u>Tema 6: REACCIONES POLARES EN MEDIO ACIDO.</u> Generación y estabilidad de carbocationes. Reacción de electrofilos con sistemas pi <u>Tema 7: REACCIONES RADICALARIAS.</u> Mecanismos. Factibilidad. Sustitución y adiciones radicalarias <u>Tema 8: REACCIONES PERICICLICAS.</u> Reacciones electrocíclicas. Reacciones térmicas y fotoquímicas. Reacciones de cicloadición						
VIGENCIA AÑOS	2026					

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR						2/4
BAHIA BLANCA		ARGENTINA				
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA						
PROGRAMA DE:				CÓDIGO: 6110		
ESTRUCTURA y MECANISMOS EN QUÍMICA ORGÁNICA				ÁREA NRO: II		
PROGRAMA ANALÍTICO						
<u>Tema 1. ESTRUCTURA DE MOLÉCULAS ORGÁNICAS.</u> Enlace químico. Enfoque cualitativo de la teoría de enlaces de valencia. Hibridación y resonancia. Geometría y energía molecular: energía de tensión. Enlaces homonucleares y heteronucleares. Electronegatividad y dipolos. Polaridad y polarizabilidad. Efectos de campo, inductivo y mesomérico. Efecto hiperconjugativo. Aromaticidad y antiaromaticidad. Reactividad. Enfoque cualitativo de la teoría de orbitales moleculares. Teoría de la perturbación de orbitales. Teoría de orbitales moleculares de Hückel. Sistemas conjugados extendidos. Orbitales frontera y reactividad química. Introducción al modelado molecular.						
<u>Tema 2. INTERACCIONES INTERMOLECULARES.</u> Interacciones no-específicas. Interacciones específicas: unión puente hidrógeno y complejos de transferencia de carga. Interacciones intermoleculares anisotrópicas. Clasificación de solventes: apolares, polares próticos y polares apróticos. Solvatación y reactividad química. Teoría cuantitativa de efectos del solvente sobre la reactividad química: Reglas de Hughes-Ingold.						
<u>Tema 3. RELACIONES ESTRUCTURA-REACTIVIDAD.</u> Acidez y basicidad de hidrocarburos. pK_a. Efecto de la estructura. Efecto del medio. Ácidos y bases de Lewis. Ácidos y bases duros y blandos: el principio de Pearson. Nucleofilia y electrofilia. Regioselectividad. Nucleofilos bidentados.						
<u>Tema 4. MECANISMOS EN REACCIONES ORGÁNICA.</u> Estudio y descripción de mecanismos de reacciones orgánicas. Paso elemental. Tipos de mecanismos. Tipos de reacciones. Postulación de mecanismos razonables. Evidencia cinética. Postulado de Hammond. Relaciones lineales de energía libre: ecuación de Hammett. Valores de sigma y rho. Conjugación directa: variación de sigma. Efectos isotópicos cinéticos primario y secundario.						
<u>Tema 5. REACCIONES POLARES EN MEDIO BÁSICO.</u> Sustitución nucleofílica alifática. Efecto de la estructura, solvente, nucleófilo y el grupo saliente. Efectos estereoelectrónicos. Sustituciones intramoleculares. Eliminaciones bimoleculares. Estereoquímica y regioespecificidad. Sustitución y adición nucleofílica en átomos de carbono alifáticos sp. Enlaces C=C activados. Adición de Michael. Reacciones del grupo carbonilo. Sustitución nucleofílica aromática en sustratos activados y no activados.						
<u>Tema 6. REACCIONES POLARES EN MEDIO ÁCIDO.</u> Generación y estabilidad de carbocationes. Sustitución nucleofílica y eliminación unimoleculares. Participación de grupos vecinos. Reordenamientos: desplazamientos de hidruros y grupos alquilo. Reacción de electrofilos con sistemas pi.						
<u>Tema 7. REACCIONES RADICALARIAS.</u> Estructura, generación y estabilidad. Reacciones radicalarias en cadena. Mecanismo. Iniciadores, inhibidores y agentes de transferencia de cadena. Factibilidad termodinámica de reacciones radicalarias. Sustitución y adiciones radicalarias. Efectos estereoelectrónicos. Prototipo: polietileno de baja densidad. Aniones radicales. Sustitución radicalaria nucleofílica.						
<u>Tema 8. REACCIONES PERICÍCLICAS.</u> Reacciones electrocíclicas. Análisis mediante orbitales frontera. Movimiento conrotatorio y disrotatorio. Interacciones suprafaciales y antarafaciales. Reacciones térmicas y fotoquímicas. Luz solar y desarrollo cancerígeno. Reacciones sigmatrópicas. Generación corporal de vitamina D₂. Reacciones de cicloadición. Estereo- y regioselectividad. Demanda electrónica inversa. Heterodienos y heterodienofilos. Cicloadiciones dipolares 1,3. Química "Click".						
VIGENCIA AÑOS	2026					

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR						3/4
BAHIA BLANCA		ARGENTINA				
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA						
PROGRAMA DE: ESTRUCTURA y MECANISMOS EN QUÍMICA ORGÁNICA				CÓDIGO: 6110		
				ÁREA NRO: II		
<u>PROGRAMA DE TRABAJOS PRÁCTICOS</u>						
Se plantea la resolución de problemas en clases de consulta. Guía 1: LA ESTRUCTURA DE LAS MOLÉCULAS ORGÁNICAS. Guía 2: EL MEDIO DE REACCION. Guía 3: ACIDEZ Y BASICIDAD. NUCLEOFILIA Y ELECTROFILIA. Guía 4: MECANISMOS DE REACCIONES ORGÁNICAS. Guía 5: REACCIONES DE BASES Y NUCLEOFILOS. Guía 6: REACCIONES DE ÁCIDOS Y ELECTROFILOS. Guía 7: RADICALES Y RADICALES ANIONES. Guía 8: REACCIONES PERICICLICAS.						
<u>METODOLOGÍA DE LA ENSEÑANZA</u>						
Mediante clases teóricas interactivas se explican los fundamentos teóricos con ayuda de diapositivas, modelos moleculares y, ocasionalmente, programas computacionales de modelado molecular o demostraciones durante la clase. Una copia de todas las diapositivas usadas en el curso se pone a disposición de los estudiantes al inicio del mismo. Dado que se consideran bases fundamentales para el estudio razonado: a) se estimula la integración de los contenidos con conocimientos adquiridos en otras asignaturas, b) se promueve la integración de conceptos de química orgánica enfatizando que un conocimiento de las características estructurales (forma, tamaño, polaridad) y las interacciones intermoleculares son las bases para entender la reactividad. c) se resalta que la diversidad de las reacciones orgánicas, y su aparente complejidad, se origina en la combinación de un número limitado de pasos elementales. d) se desalienta la visualización esquemática de la reactividad basada exclusivamente en el enfoque de grupo funcional; para ello se trata permanentemente de situar al estudiante frente al problema concreto y de utilizar sustratos polifuncionales. Este tipo de análisis se ve facilitado por la elección de tratar todas las reacciones heterolíticas en dos temas, ya sea básico o ácido el tipo de reactivo/medio involucrado. Muchos de los ejemplos de reactividad dados en la teoría o en los problemas planteados en la Guía de Problemas, provienen de la síntesis de fármacos, o de la síntesis industrial en general, lo que da una perspectiva real acerca de la aplicación de estas reacciones cuando se hace un uso práctico de la síntesis química en beneficio de la fabricación de estructuras de interés. En las clases de consulta, que no son obligatorias, se analizan todos los problemas de la guía de manera secuencial. Los estudiantes deben presentar en el pizarrón su resolución, o intento de ella, de uno de los problemas de la guía y discutir las distintas alternativas con el resto de los presentes. Esta discusión es inducida, moderada, dirigida y/o corregida por el docente presente, que promueve la alternancia de los expositores a fin de garantizar una participación activa de todos ellos.						
VIGENCIA	AÑOS	2026				

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR			4/4
BAHIA BLANCA		ARGENTINA	
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA			
PROGRAMA DE: ESTRUCTURA y MECANISMOS EN QUÍMICA ORGÁNICA		CÓDIGO: 6110	
		ÁREA NRO: II	
<u>FORMA DE EVALUACIÓN</u> La materia se aprueba por promoción. Para ello los estudiantes deben sumar 180 sobre 300 puntos en tres exámenes parciales de 3 horas. El mismo examen permite cursar la asignatura si se reúnen entre 135 y 180 puntos y luego rendir el tradicional examen final. En los parciales y en el examen final se testean habilidades adquiridas mediante problemas de aplicación de conceptos teóricos a casos concretos, similares a los planteados en la guía de problemas. Así se promueve la aplicación de los conceptos en la resolución de problemas antes que solicitar la repetición de los mismos. <u>BIBLIOGRAFIA</u> F. A. Carey, R. J. Sundberg, "Advanced Organic Chemistry. Part A: Structure and Mechanisms", 5° ed, Springer Verlag, 2007. I. Fleming, "Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions: Reference Edition", John Wiley & Sons, Ltd, 2010. J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, "Organic Chemistry", 2ª ed., Oxford, 2012. P. Ballesteros García, R. M. Claramunt Vallespi, D. Sanz del Castillo, E. Teso Vilar. "Química Orgánica Avanzada" UNED - Universidad Nacional de Educación a Distancia, 2013. K. A. Savin. "Writing Reaction Mechanisms in Organic Chemistry". 3° ed. Academic Press, 2014. M. B. Smith, J. March, "Advanced Organic Chemistry", 6° ed. J. Wiley & Sons, 2007. R.B. Grossman. "The Art of Writing Reasonable Organic Reaction Mechanisms". 3° ed. Springer Nature, 2019. M. Shankar Singh. "Reactive Intermediates in Organic Chemistry. Structure, Mechanism, and Reactions". Wiley-VCH, 2014. J. Singh, J. Singh. "Photochemistry and Pericyclic Reactions". 3° ed. New Academic Science Limited, 2012. Artículos científicos recientes (reviews).			
AÑO	PROFESORA RESPONSABLE (firma aclarada)	AÑO	PROFESORA RESPONSABLE (firma aclarada)
2026	ANA PAULA MURRAY		
V I S A D O			
COORDINADORA/A AREA		SECRETARIO/A ACADEMICO/A	
FECHA:		FECHA:	