

QUI 2883

SEMINARIO IV

CARGA HORARIA TOTAL: ----

No. CRÉDITOS: 0

PROFESOR (A):

OBJETIVO

Discutir y evaluar los avances recientes en química.

RESUMEN

Presentaciones realizadas por Profesores convidados sobre temas relacionados a los avances en los diversos campos de la química.

PROGRAMA

-

EVALUACIÓN

Asistencia a los seminarios

**BIBLIOGRAFIA
PRINCIPAL**

Bibliografía variable

**BIBLIOGRAFIA
COMPLEMENTARIA**

Artículos científicos

QUI 3004

EXAMEN DE CALIFICACIÓN

CARGA HORARIA TOTAL: ----

No. CRÉDITOS: 0

PROFESOR (A):

OBJETIVO

Verificar si el alumno está apto para desarrollar el tema escogido para su tesis de doctorado

RESUMEN

-

PROGRAMA

Examen a realizarse de acuerdo con el reglamento interno de la comisión de pos-graduación del departamento.

EVALUACIÓN

Presentación ante una junta evaluadora.

**BIBLIOGRAFIA
PRINCIPAL**

Bibliografía variable.

**BIBLIOGRAFIA
COMPLEMENTARIA**

-

QUI 3213

PRÁCTICA DE DOCENCIA EN EL PREGRADO

CARGA HORARIA TOTAL: 45 HORAS No. CRÉDITOS: 3

PROFESOR (A):

OBJETIVO

Familiarizar al alumno con actividades de enseñanza en los laboratorios o en el salón de clase.

RESUMEN

Esta práctica comprende tareas relacionadas con cargos académicos, con participación en la enseñanza supervisada en solo una (01) asignatura de pregrado por semestre.

PROGRAMA

-

EVALUACIÓN

Desempeño del alumno en el cumplimiento de sus actividades docentes.

**BIBLIOGRAFIA
PRINCIPAL**

Bibliografía variable.

**BIBLIOGRAFIA
COMPLEMENTARIA**

-

QUI 3223

PRÁCTICA DE DOCENCIA EN EL PREGRADO

CARGA HORARIA TOTAL: 45 HORAS No. CRÉDITOS: 3

PROFESOR (A):

OBJETIVO

Familiarizar al alumno con actividades de enseñanza en los laboratorios o en el salón de clase.

RESUMEN

Esta práctica comprende tareas relacionadas con cargos académicos, con participación en la enseñanza supervisada en solo una (01) asignatura de pregrado por semestre.

PROGRAMA

-

EVALUACIÓN

Desempeño del alumno en el cumplimiento de sus actividades docentes.

**BIBLIOGRAFIA
PRINCIPAL**

Bibliografía variable.

**BIBLIOGRAFIA
COMPLEMENTARIA**

-

QUI 2527

**MÉTODOS ESPECTROMÉTRICOS II
(ESPECTROMETRÍA DE EMISIÓN ÓPTICA Y DE
MASAS CON PLASMA INDUCTIVAMENTE
ACOPLADO ICP-OES E ICP-MS)**

CARGA HORARIA TOTAL: 45 HORAS

No. CRÉDITOS: 3

PROFESOR (A):

OBJETIVO

Presentar y discutir los fundamentos teóricos de los métodos espectrométricos de análisis inorgánica con plasma inductivamente acoplado: ICP OES e ICP-MS.

RESUMEN

Espectrometría de Emisión Óptica con Plasma Inductivamente Acoplado (ICP-OES): Espectros; Instrumentación (fuentes de excitación sistemas ópticos, detectores; sistemas de introducción de muestras); interferencias espectrales y no espectrales; técnicas de calibración; parámetros de mérito; aplicaciones del ICP-OES.

Espectrometría de masas con plasma inductivamente acoplado (ICP-MS): Principios teóricos; instrumentación (plasma, interface, separadores de masa, detectores) ; interferencias en ICP-MS; técnicas de calibración y dilución isotópica; introducción de muestras líquidas y sólidas en ICPMS (micro-muestreo, introducción discreta de muestras, análisis por inyección en flujo (FIA), ablación *laser*, vaporización electrotérmica (ETV)); técnicas combinadas para el análisis de especiación (cromatografía de iones, electroforesis capilar); parámetros de mérito; aplicaciones.

PROGRAMA

De acuerdo con el programa presentado.

EVALUACIÓN

Dos pruebas escritas. La calificación final será calculada por el promedio de las dos notas.

**BIBLIOGRAFIA
PRINCIPAL**

A. Montaser e D.W, Golightly, "Inductively Coupled Plasmas in Analytical Atomic Spectrometry", VCH Publishers Inc., 1992.
A. Montaser, "Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry", John Wiley, 1998;
K. E. Jarvis, A. L. Gray, R. S. Houk, "Handbook of ICP-MS", Blackie & Son Ltd., 1992.

**BIBLIOGRAFIA
COMPLEMENTARIA**

M.F. Giné, "Espectrometria de emissão atômica com plasma" CENA, USP, 1998.
M.F. Giné, "Espectrometria de massas com fonte de plasma" CENA, USP, 1999.
D. Beauchemin et al., "Discrete Sample Introduction Techniques for ICPMS", Elsevier 2000.
Holler, F. J.; Skoog, D.A & Crouch, S. R. Princípios de análise instrumental. 6. Ed. Bookman: Porto Alegre, 2009. 1056p.

Cienfuegos P., Freddy S.; Vaitsman, D. S. Análise Instrumental.
Interciência: Rio de Janeiro, 2000. 606 p.

QUI 2741

LABORATORIO DE MÉTODOS ESPECTROMÉTRICOS II

CARGA HORARIA TOTAL: 30 HORAS No. CRÉDITOS: 2

PROFESOR (A):

OBJETIVO

Familiarizar al alumno con los aspectos experimentales de dos importantes métodos espectrométricos de análisis inorgánica: ICP-OES e ICP-MS.

RESUMEN

Evaluación experimental de diferentes sistemas de introducción de muestras para soluciones acuosas y orgánicas, y para sólidos. Optimización de las condiciones de medición en OES con diferentes fuentes de excitación (GFL, ICP) y en ICP-MS. Estudio y corrección de interferencias espectrales y no espectrales. Técnicas de calibración en OES y ICP-MS y determinación de las características de desempeño. Aplicaciones típicas de ambas técnicas en la determinación de elementos trazos en matrices diversas. Técnicas combinadas para análisis de especiación.

PROGRAMA

Experiencias y demostraciones realizadas en línea con el programa presentado y los temas del curso teórico (QUI 2527).

EVALUACIÓN

Dos pruebas escritas abordando los aspectos prácticos de las técnicas. Una tercera nota será obtenida por la evaluación de los informes de laboratorio. La nota final será calculada por el promedio de las tres notas.

BIBLIOGRAFIA PRINCIPAL

A. Montaser e D.W, Golightly, "Inductively Coupled Plasmas in Analytical Atomic Spectrometry", VCH Publishers Inc., 1992.

A. Montaser, "Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry", John Wiley, 1998;

D. Beauchemin et al., "Discrete Sample Introduction Techniques for ICPMS", Elsevier 2000.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTARIA

Publicaciones y artículos de literatura corriente.

QUI 2051

INVESTIGACIÓN DE TESIS DE DOCTORADO I

CARGA HORARIA TOTAL: 45 HORAS

No. CRÉDITOS: 3

PROFESOR (A):

OBJETIVO

Preparar al alumno para desarrollar su tesis de doctorado.

RESUMEN

-

PROGRAMA

Investigación conducida por el alumno sobre orientación de su profesor orientador, para la elaboración de su tesis de doctorado. Esta asignatura solo puede ser cursada por los alumnos que hayan sido aprobados en el examen de calificación.

**BIBLIOGRAFIA
PRINCIPAL**

Bibliografía variable.

**BIBLIOGRAFIA
COMPLEMENTARIA**

-

QUI 2052

INVESTIGACIÓN DE TESIS DE DOCTORADO II

CARGA HORARIA TOTAL: 45 HORAS

No. CRÉDITOS: 3

PROFESOR (A):

OBJETIVO

Preparar al alumno para desarrollar su tesis de doctorado.

RESUMEN

-

PROGRAMA

Investigación conducida por el alumno sobre orientación de su profesor orientador, para la elaboración de su tesis de doctorado. Esta asignatura solo puede ser cursada por los alumnos que hayan sido aprobados en el examen de calificación.

EVALUACIÓN

Desempeño del alumno en el laboratorio e/o presentación de informes.

**BIBLIOGRAFIA
PRINCIPAL**

Bibliografía variable.

**BIBLIOGRAFIA
COMPLEMENTARIA**

-

QUI 2629

TEMAS ESPECIALES DE QUÍMICA ANALÍTICA

CARGA HORARIA TOTAL: 45 HORAS

No. CRÉDITOS: 3

PROFESOR (A):

OBJETIVO

-

RESUMEN

Temas avanzados no incluidos en las otras asignaturas del área.

PROGRAMA

-

EVALUACIÓN

Pruebas e/o seminarios.

**BIBLIOGRAFIA
PRINCIPAL**

Variada, constando principalmente de artículos científicos.

**BIBLIOGRAFIA
COMPLEMENTARIA**

-

QUI 2225

PRODUCCIÓN CIENTÍFICA EN EL DOCTORADO

CARGA HORARIA TOTAL: ----

No. CRÉDITOS: 0

PROFESOR (A):

OBJETIVO

Evaluar el progreso del trabajo de tesis del candidato y garantizar la preparación de un (01) manuscrito relacionado con la tesis de doctorado, en la que el alumno es el primer autor, en tiempo hábil para la presentación y aceptación de la revista científica indexada hasta la aprobación de la junta de defensa de tesis junto a la CPG-Qui.

RESUMEN

La disciplina obedecerá a las disposiciones del artículo 6 del capítulo VI del nuevo reglamento Interno de la PPG-Qui, que prevé la preparación y presentación de material científico inédito ante los miembros de una junta examinadora compuestas por el profesor orientador y dos (02) profesores doctores. Un desglose de las actividades previstas y descritas en el programa.

PROGRAMA

-Preparar y entregar para los miembros de la junta, en la forma de material impreso y con quince (15) días de anticipación, un manuscrito científico, escrito **en inglés**, que contenga resultados no publicados del proyecto de tesis doctoral para su futura presentación a revista indexada, preferiblemente internacional. Observación: No se aceptarán artículos de revisión para este propósito. Además, deberá entregarse un material impreso breve (**hasta cinco (05) páginas**, hoja A4, doble espacio, fuente *Times New Roman* o *Arial* tamaño 12) que contenga un título y objetivos de la tesis, una descripción concisa de los resultados obtenidos por calendario detallado y cronograma de actividades para el resto del tiempo de curso.

-Hacer una presentación oral que dure de treinta (30) a cuarenta (40) minutos que, a criterio del orientador, puede ser pública o no. Durante la presentación, el candidato debe abordar las principales motivaciones de la investigación, los resultados obtenidos hasta ahora, lo que queda por completar (incluida la metodología propuesta) y un cronograma detallada de actividades para el tiempo de doctorado restante. La presentación será seguida por una discusión con el estudiante por parte de los miembros de la junta examinadora.

EVALUACIÓN

Basada en la cualidad del manuscrito científico presentado y del progreso del trabajo de tesis en relación con los objetivos originalmente propuestos (Aprobado o no aprobado, sin calificación)

BIBLIOGRAFIA PRINCIPAL

Bibliografía variable.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTARIA

Artículos científicos en el área de concentración del candidato.

QUI 2529

RADIOQUÍMICA APLICADA

CARGA HORARIA TOTAL: 45 HORAS

No. CRÉDITOS: 3

PROFESOR (A):

OBJETIVO

Introducción de conceptos básicos que involucran el fenómeno de la radioactividad, las clases de radiaciones ionizantes, la interacción de la radiación con la materia, la medición de radioactividad, el balance radiactivo, la protección radiológica y la manipulación segura de las fuentes radioactivas, la radioactividad natural y su aplicación en estudios ambientales.

RESUMEN

1. Introducción;
2. Clases de decaimiento radiactivo;
3. Radioactividad natural y artificial;
4. Ecuaciones de decaimiento radiactivo;
5. Nociones de la interacción de la radiación con la materia;
6. Nociones de la medición de la radioactividad;
7. Concepto de exposición y dosis;
8. Efectos biológicos de las radiaciones;
9. Norma básica de la Comisión Nacional de Energía Nuclear (CNEN);
10. Aplicaciones de la radioactividad natural en estudios ambientales;
11. Clases prácticas:
 - a. Funcionamiento del detector Geiger-Mueller
 - b. Tiempo muerto del detector Geiger-Mueller
 - c. Estadística de contaje.
 - d. Absorción de partículas beta.
 - e. Ley del cuadrado inverso de la distancia.
 - f. Determinación del tiempo de vida media.
 - g. Espectrometría Gama.

PROGRAMA

-

EVALUACIÓN

Seminario e informes de las clases prácticas.

BIBLIOGRAFIA PRINCIPAL

- Norma básica de CNEN
- Keller, Cornelius. 1981. Radioquímica. Editora Universitária, Universidade Federal de Pernambuco.
- Choppin, Gregory; Liljenzin, Jan-Oloy; Rydberg, Jan; Butterworth-Heinemann. 2016. Radiochemistry and Nuclear Chemistry. 2nd Edition of Nuclear Chemistry, Theory and Applications.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTARIA

- Katz, Sidney A., Bryan, Jeff C. 2016. Experiments in Nuclear Science. CRC Press.
- Lehto, Jukka. 2017. Basics of Nuclear Physics and of Radiation Detection and Measurement. Open access book.

LET 3106

**EXAMEN DE PROFICIENCIA EN LENGUA
EXTRANJERA: INGLÉS - DOCTORADO**

CARGA HORARIA TOTAL: ----

No. CRÉDITOS: 0

PROFESOR (A):

OBJETIVO

Evaluar el desempeño del estudiante en el conocimiento de inglés como segunda lengua

RESUMEN

-

PROGRAMA

-

EVALUACIÓN

Examen único.

**BIBLIOGRAFIA
PRINCIPAL**

Bibliografía

**BIBLIOGRAFIA
COMPLEMENTARIA**

-

LET 3001

TESIS DE DOCTORADO

CARGA HORARIA TOTAL: ----

No. CRÉDITOS: 0

PROFESOR (A):

OBJETIVO

Desarrollar trabajo empleando los conocimientos adquiridos en el doctorado y que tenga interés científico.

RESUMEN

Investigación conducida por el alumno, bajo la orientación de su profesor orientador, para la elaboración de su tesis de doctorado. Esta materia solo puede ser cursada por alumnos que hayan sido aprobados en el examen de calificación.

PROGRAMA

Desarrollo de trabajo científico de acuerdo con el área de investigación en que el alumno está involucrado.

EVALUACIÓN

Sustentación del trabajo de doctorado

**BIBLIOGRAFIA
PRINCIPAL**

Bibliografía variable.

QUI 2432

CATÁLISIS HETEROGÉNEA

CARGA HORARIA TOTAL: 45 HORAS

No. CRÉDITOS: 3

PROFESOR (A):

OBJETIVO

Introducir los conceptos básicos de catálisis heterogénea.

RESUMEN

Introducción y definiciones. Adsorción. Cinética de reacciones heterogéneas. Preparación, caracterización y evaluación de catalizadores. Reactores de laboratorio. Desactivación de catalizadores. Procesos catalíticos.

PROGRAMA

Introducción a la catálisis heterogénea. Definiciones básicas. Adsorción física y química. Isotermas de adsorción: BET, Langmuir, etc. Reacciones heterogéneas. Expresiones cinéticas de Hougen-Watson para reacciones monomoleculares reversibles e irreversibles. Expresiones cinéticas de Hougen-Watson para reacciones bimoleculares reversibles. Mecanismos de Langmuir-Hinshelwood e Eley-Rideal. Selección de catalizadores. Criterios experimentales y teóricos. Estudio de casos. Preparación de catalizadores. Materias primas y operaciones unitarias involucradas. Caracterización de catalizadores. Técnicas y equipos. Estudio de casos. Evaluación de catalizadores. Reactores y condiciones utilizados en laboratorio. Desactivación de catalizadores. Mecanismos y formas de evitar. Reactores catalíticos industriales. Características y condiciones operacionales. Estudio de aplicaciones industriales. Procesos de reforma catalítica, craqueamiento catalítico, hidrogenación selectiva, etc.

EVALUACIÓN

3 seminarios con presentación oral.

BIBLIOGRAFIA PRINCIPAL

Apostillas de la Profesora Maria Isabel Pais; Introdução à Catálise Heterogênea, D. Cardoso.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTARIA

Gates – Catalytic Chemistry; Giuseppe Gianetto – Zeolitas; G. Ertl, H. Knozinger, J. Weitkamp - Handbook of Heterogeneous Catalysis.

QUI 2612

**TEMAS ESPECIALES DE QUÍMICA INÓRGANICA
(BIOINORGÁNICA Y QUÍMICA INORGÁNICA
MEDICINAL)**

CARGA HORARIA TOTAL: 45 HORAS

No. CRÉDITOS: 3

PROFESOR (A):

OBJETIVO

- 1) Estudiar el papel de los elementos representativos y de transición en los organismos vivos; 2) Evaluar el uso de complejos de coordinación y ligantes orgánicos en el diagnóstico y tratamiento de una serie de patologías humanas.

RESUMEN

Introducción a la Bioquímica Estructural; Nociones básicas de metabolismo y Bioenergética; Elementos químicos y la vida; Principios de la Química de coordinación aplicados a la Bioinorgánica; Métodos físicos en Química Bioinorgánica; Funciones generales de los elementos biológicos; Oxígeno en Biología; Enzimas activadas por metales y metaloenzimas; Ciclo del nitrógeno; Fotosíntesis; Química inorgánica Medicinal

PROGRAMA

Biomoléculas y composición celular; catabolismo y anabolismo; NAD⁺ y NADP⁺; elementos constituyentes de los materiales biológicos; selección de los elementos químicos por los sistemas vivos; esencialidad y toxicidad; aspectos termodinámicos y cinéticos de la Química de Coordinación en los sistemas vivos; Difracción y absorción de rayos X; EPR; RMN, espectroscopias vibracional y electrónica; mediciones magnéticas; Funciones biológicas de los elementos químicos; almacenamiento y transporte de hierro; transporte de oxígeno molecular; dióxígeno y sus productos de reducción; citocromos; proteínas azules de cobre; proteínas de hierro-azufre; enzimas activadas por metales y metaloenzimas; sistemas biomiméticos; reacciones relativas a la producción de energía; nitrogenasa; transporte de electrones en la fotosíntesis; sistema fotosintético II; descomposición del agua; Química inorgánica Medicinal; diagnóstico y tratamiento; ciclo de seminarios con investigadores del área.

EVALUACIÓN

Pruebas y trabajos.

**BIBLIOGRAFIA
PRINCIPAL**

- DEVLIN, T.M. (Coord). Manual de Bioquímica com correlações Clínicas – Tradução de la 7ª. Ed. Americana, Blucher, São Paulo, **2011**.
- FRAÚSTO DA SILVA, J.J. R.; DA SILVA, J.A.L. Os Elementos Químicos e a Vida, IST Press, boa, **2011**.
- LIPPARD, S.J.; BERG, J.M. Principles of Bioinorganic Chemistry, University Science Books, Valley – California, **1994**.

**BIBLIOGRAFIA
COMPLEMENTARIA**

- SHRIVER, D.F.; ATKINS, P.W.; OVERTON, T.L.; ROURKE, J.P.; WELLER, M.T.; ARMSTRONG, F.A. Shiver & Atkins – Química Inorgánica – 4° Ed., Bookman, PoA, **2008**.
- TOMA, H.E. Colección de Química conceptual. Vol 5; Química Bioinorgánica y Ambiental, Blucher, São Paulo, **2015**.

QUI 2640

**TÓPICOS ESPECIALES DE QUÍMICA ORGÁNICA
(MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS EN QUÍMICA
ORGÁNICA)**

CARGA HORARIA TOTAL: 45 HORAS

No. CRÉDITOS: 3

PROFESOR (A):

OBJETIVO

El objetivo de esta disciplina es presentar al alumno de postgrado las técnicas espectroscópicas para la caracterización de compuestos orgánicos. Una orientación para el estudio teórico – práctico de los tres métodos espectroscópicos más comúnmente utilizados en Química Orgánica para elucidar las estructuras de las moléculas.

RESUMEN

Teoría básica, instrumentación e interpretación de los espectros de Resonancia Magnética Nuclear de Hidrogeno (RMN-¹H) y carbono (RMN-¹³C). RMN de correlación espectroscópica homonuclear bidimensional (2D) de hidrogeno e hidrogeno (¹H-¹H COSY) y de correlación heteronuclear (¹H-¹³C HETCOR). Teoría básica, instrumentación e interpretación de espectros en el infrarrojo y RAMAN.

PROGRAMA

I – Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear Protónica: Historia, teoría básica, instrumentación, técnicas de pulso y transformadas de Fourier, manipulación de la muestra, espectro de ¹H-RMN, desplazamiento químico de protones enlazados al carbono, factores que afectan el desplazamiento químico, acoplamiento spin – spin, doble resonancia (desacoplamiento), desplazamiento químico de protones enlazados a heteroátomos, equivalencia química y magnética, ejemplos, ejercicios y practica en laboratorio.

II – Espectroscopia de ¹³C-RMN:

Diferencias fundamentales entre ¹H-RMN y ¹³C-RMN: Ventajas y desventajas, desplazamiento químico, acoplamiento spin-spin, efecto nuclear de overhauser, aplicaciones de RMN de carbono 13, ejemplos, ejercicios, RMN de correlación espectroscópica homonuclear bidimensional (2D) de hidrogeno e hidrogeno (¹H-¹H COSY) y de correlación heteronuclear (¹H-¹³C HETCOR).

Uso del equipo de RMN 400 MHz Advance Bruker: Registro de espectro de rutina, integración, expansión de espectros, uso de lock y shimming.

III – Espectrometría en el infrarrojo y Raman:

Teoría básica, instrumentación, procedimiento experimental de la espectroscopia con transformación de Fourier (FT-IR). Frecuencias vibracionales características de los grupos funcionales, ejemplos, ejercicio y prácticas en laboratorio con el espectrofotómetro FT-IR-ATR (PerkinHelmer). Discusión de artículos sobre el uso de la Espectroscopia FT-IR para materiales de interés de tesis de doctorado o disertación de maestría.

Teoría básica de la espectroscopia de dispersión RAMAN. Principio y aplicaciones de la espectroscopia RAMAN y Surface Enhancement Raman Spectroscopy (SERS). Actividades prácticas para adquisición de un espectro Raman y evaluación de resultados experimentales. Procedimiento para la calibración del microscopio confocal Raman (modelo Xplora-Horiba) y ajuste de los parámetros de adquisición. Discusión de artículos sobre el uso de espectroscopia Raman para materiales de interés de tesis de doctorado o disertación de maestría.

EVALUACIÓN

Evaluación a través de pruebas escritas y seminario.

BIBLIOGRAFIA PRINCIPAL

Bibliografía Básica - 1:

PAVIA, D.L.; LAMPMAN, G.M.; KRIZ, G.S.; VYVYAN, J.R. Introducción a la Espectroscopia. Cengage Learning 2010, 4ª Ed.

Bibliografía Básica - 2:

SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F.X.; KIEMLE, D. J. Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos. 7 ed. Rio de Janeiro; LTC – Livros Técnicos Científicos Editores S.A, 2006.

Bibliografía Básica - 3:

Dudley H. Williams e Ian Fleming, Spectroscopic Methods in Organic Chemistry, McGraw-Hill Book Company, London, 1989.

P. Atkins J. de Paula, Quanta, Matéria e Mudança. Uma abordagem molecular para a Físico-Química.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTARIA

1. Infrared and Raman Spectroscopy Imaging, Edited by Reiner Salzer and Heinz W. Siesler, Wiley- VCH, 2008.

2. Infrared and Raman Spectroscopy, Method and Applications, edited by Bernhard Scharader, VHC, 1995

3. R. J. Abraham, J. Fisher e P. Loftus, Introduction to NMR Spectroscopy, John Wiley & Sons, 1991

QUI 2641

TEMAS ESPECIALES DE QUÍMICA ORGÁNICA (SÍNTESIS ORGÁNICA)

CARGA HORARIA TOTAL: 45 HORAS

No. CRÉDITOS: 3

PROFESOR (A):

OBJETIVO

Introducir conceptos de análisis retro-sintética y planeamiento de síntesis totales. Abordar métodos de manipulación de grupos funcionales. Discutir algunas de las principales estrategias para la formación de enlaces carbono – carbono, enfocándose en los aspectos de reactividad, quimio, regio y estereoselectividad.

RESUMEN

Introducción a la síntesis orgánica; formación de enlaces carbono-carbono y carbono – heteroátomo catalizadas por metales de transición; adición a compuestos carbonílicos; química de enoles y enolatos; reacciones pericíclicas.

PROGRAMA

1. **Introducción:** conceptos y estrategias sintéticas, retro-síntesis, síntesis lineal y convergente.
2. **Formación de enlaces carbono-carbono y carbono-heteroátomo catalizada por metales de transición:** a) introducción a los ciclos catalíticos (etapas elementales y regla de los 18 electrones). b) reacción de Heck. c) acoplamientos cruzados (Suzuki, Sonogashira, Negishi, Stille, etc). d) Aminación de Buchwald Hartwig. e) Acoplamientos C-C con activación C-H.
3. **Adición a compuestos carbonílicos:** a) modelos de Cram, Felkin-Ahn y Burgi Dunitz. b) Adición de organometálicos. c) adición conjugada de organocupratos.
4. **Química de enoles y enolatos:** a) aspectos generales – generación y estereoquímica de enolatos, modelo de Ireland. b) alquilación de compuestos carbonílicos e imínicos: Condensación aldólica y reacciones análogas. c) reacción de Mannich. d) reacción de Michael.
5. **Reacciones pericíclicas:** a) reacciones de cicloadición [2+2], [3+2], [4+2] homo y heteronucleares.

EVALUACIÓN

Seminario y pruebas escritas.

BIBLIOGRAFIA PRINCIPAL

Smith, M. B. Organic Synthesis, McGraw-Hill 3rd edition, 2010.
Carey, F. A., Sundberg, R. J. Advanced Organic Chemistry. Part B – Reactions and Synthesis, Academic Press, 5th edition, 2007.
Clayden, J. et al. Organic Chemistry. 2nd ed. New York: Oxford University Press, 2010

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTARIA

De Meijere, A.; Diedrich, F. Metal-Catalyzed Cross-Coupling Reactions. WileyVCH, 2nd edition, 2004.
Wills. C.; Wills, M. Organic Synthesis, Oxford Science Publications, 1st edition, 1996.
Noiyori, R. Asymmetric Catalysis in Organic Synthesis, Wiley, 1994

QUI 2434

TÉCNICAS DE DISPERSIÓN DE RADIACIÓN APLICADAS A NANOMATERIALES

CARGA HORARIA TOTAL: 45 HORAS

No. CRÉDITOS: 3

PROFESOR (A):

OBJETIVO

Esta disciplina tiene como objetivo ofrecer la formación teórica necesaria para los alumnos de postgrado utilizar técnicas de dispersión, realizar ajustes, análisis e interpretación de datos adecuadamente. Estas técnicas son importantes para caracterización de tamaño, forma, estructura, estabilidad y carga superficial de sistemas coloidales y nanomateriales (como micelas, emulsiones, polímeros, nanopartículas, materiales mesoporosos y cristales líquidos). El contenido tiene un abordaje interdisciplinar, siendo de interés para investigaciones de diferentes áreas de la química, física e ingeniería de materiales, como también para aplicaciones industriales. El curso proporcionará a los alumnos: a) aulas teóricas de los fundamentos de los fenómenos involucrados con demostraciones prácticas en el laboratorio de fisico-química; b) contacto con los equipos a disposición de la universidad.

RESUMEN

Fenómenos de dispersión. Dispersión de luz dinámico (DLS) y estático (SLS). Dispersión de rayos-X a bajos y altos ángulos (SAXS, WAXS y rayos-X). Dispersión de neutrones (SANS). Aplicación y combinación de todas las técnicas para áreas de nanociencias, coloides y materiales. Caracterización de tamaño, forma, estructura y carga superficial.

PROGRAMA

Teoría básica de dispersión (interferencia). Fenómeno de dispersión de luz, dispersión Rayleigh y Mie. Dispersión de luz dinámico (DLS) – Coeficiente de difusión y rayo hidrodinámico. Ecuación de Stokes – Einstein. Función de correlación. Tiempo de decaimiento. Régimen difusivo. Métodos de ajustes (acumulativo, CONTIN, Laplace). Instrumentación. Estudio de casos académicos e industriales. Potencial Zeta – principios básicos, aplicaciones y medidas. Dispersión de luz estático (SLS) – vector de dispersión. Intensidad en función del ángulo y/o concentración. Rayo de giro. Polidispersión. Zimm-plot. Dispersión de rayos-X – Factor de forma. Factor estructura (interferencia). Difracción. Dispersión de rayos-X a bajos ángulos (SAXS). Dispersión de rayos-X a altos ángulos (WAXS). Dispersión de neutrones – principios de SANS. Uso de isótopos para control de contraste. Aplicaciones. Ajustes. Nociones de otras técnicas complementales – ej.: resonancia de Plasmon de superficie (SPR) y dispersión Raman amplificado por superficie (SERS). Combinación de diferentes técnicas y estudios de casos.

EVALUACIÓN

Pruebas escritas.

**BIBLIOGRAFIA
PRINCIPAL**

Borsali, R.; Pecora, R.; Soft Matter Characterization, Vol. 1, New York, NY: Springer, 2008.

Schärftl, W.; Light Scattering from Polymer Solutions and Nanoparticle Dispersions, Berlin: Springer, 2007.

Stribeck, N.; X-Ray Scattering of Soft Matter, Berlin: Springer, 2007.

**BIBLIOGRAFIA
COMPLEMENTARIA**

Percebom, A.M.; Apostila do Curso: Técnicas de Espalhamento Aplicadas a Nanomateriais, 2016.

Roe, R.J.; Methods of X-Ray and Neutron Scattering in Polymer Science, New York: Oxford University Press, Inc., 2000.

Glatter, O.; Kratky, O.; Small Angle X-Ray Scattering, London: Academic Press inc., 1982.

Pecora R.; Dynamic Light Scattering: Applications of Photon Correlation Spectroscopy. London: Plenum, 1985.