

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR				1/5	
BAHIA BLANCA		ARGENTINA			
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA					
PROGRAMA DE: QUIMICA ORGANICA ANALÍTICA				CÓDIGO: 6393	
				ÁREA NRO: II	
HORAS DE CLASE				PROFESOR/A RESPONSABLE	
TEÓRICAS		PRÁCTICAS		Dr. Gustavo F. Silbestri	
Por semana	Por cuatrimestre	Por semana	Por cuatrimestre		
4	50	3	40		
ASIGNATURAS CORRELATIVAS PRECEDENTES					
APROBADAS			CURSADAS		
PRACTICAS DE QUIMICA ORGANICA (6266)					
DESCRIPCIÓN / OBJETIVOS					
<p>La asignatura tiene como objetivo la introducción del alumno al conocimiento de los fundamentos del análisis espectroscópico y su utilización en la determinación de estructuras orgánicas. Se desarrollan temas relacionados con la Espectrometría de Masas, Espectroscopia Infrarroja y Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear. Las clases prácticas implican la resolución de problemas que ilustran la utilidad de cada método en la dilucidación de estructuras.</p>					
PROGRAMA SINTÉTICO					
<p>TEMA 1: <u>Espectrometría de Masas</u>. Fundamento. Ion molecular. Fragmentos. Aplicaciones. Interpretación de espectros.</p> <p>TEMA 2: <u>Espectroscopia Infrarroja</u>. Fundamento. Espectro infrarrojo. Aplicaciones. Interpretación de espectros.</p> <p>TEMA 3: <u>Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear</u>. Fundamento multinuclear. Desplazamiento químico. Acoplamiento. Resonancia Magnética de ^1H y de ^{13}C. Aplicaciones. Interpretación de espectros</p>					
VIGENCIA AÑOS		2022			

BAHIA BLANCA

ARGENTINA

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

PROGRAMA DE: QUÍMICA ORGÁNICA ANALÍTICA

CÓDIGO: 6393

ÁREA NRO: II

PROGRAMA ANALÍTICO

TEMA 1: ESPECTROMETRIA DE MASAS (EM). Introducción a la EM. Fundamentos. Sistemas de producción de iones. Impacto electrónico. Ionización química. Métodos de desorción. Factores que gobiernan la estabilidad de los iones. Ion molecular, características. Pico base. Iones metaestables. Composición elemental: M+1, M+2. Regla del nitrógeno. Modos de fragmentación Rupturas características de: hidrocarburos saturados, no saturados, aromáticos, alcoholes, compuestos carbonílicos, aminas, etc. Interpretación de espectros. **ESPECTRÓMETRO DE MASA.** Introducción de la muestra. Directa. Indirecta. Sistema acoplado con cromatografía gaseosa. Sistema acoplado con cromatografía líquida de alta resolución. Resolución. Sensibilidad. Rango de masa. Sistemas de enfoque. Enfoque magnético. Enfoque eléctrico. Cuadrupolo. Instrumentos de doble enfoque magnético - eléctrico. Tiempo de vuelo. Aplicaciones

TEMA 2: ESPECTROSCOPIA INFRARROJA. Origen del espectro infrarrojo. Energía vibracional de una molécula. Vibraciones activas en el infrarrojo. Vibraciones fundamentales, sobretonos y de combinación. Obtención del espectro infrarrojo. Espectroscopía infrarroja por Transformada de Fourier. Bandas características o frecuencias de grupos. Factores que influyen en la posición e intensidad de las bandas. Tablas de correlación. Interpretación de espectros de moléculas orgánicas. Aplicaciones de la espectroscopía infrarroja. Análisis cuali- y cuantitativo.

TEMA 3: ESPECTROSCOPIA DE RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR. Propiedades magnéticas de los núcleos. Número de espín. Momento magnético. Distribución de la carga nuclear. Momento cuadrupolar. Interacción con un campo magnético. Niveles de espín. Movimiento precesional. Frecuencia de Larmor. Frecuencia de los núcleos más comunes. Equipos de onda continua y por pulsos. Sistema de coordenadas rotante. Tiempo de pulso. Angulo de pulso. Relajación del espín nuclear (T1, T2) Transformada de Fourier. FID. Desplazamiento químico. Unidades. Desplazamiento químico de ¹H. Factores que lo afectan. Densidad electrónica, anisotropía. Desplazamiento químico de ¹³C. Factores que lo afectan. Predicción de desplazamiento químico: uso de tablas. Acoplamiento espín-espín. Multiplicidad de señales. Mecanismo de acoplamiento: efecto Fermi. Constante de acoplamiento. Factores que la afectan. Núcleos equivalentes. Sistemas de acoplamiento de primer y segundo orden. Relación entre la constante de acoplamiento, estructura y estereoquímica de un compuesto: ecuación de Karplus. Núcleos intercambiables. Efecto de la dilución y la temperatura. Congelamiento conformacional. RMN dinámica. Desacoplamiento espín-espín. Doble resonancia. Desacoplamiento homo- y heteronuclear. Efecto Nuclear Overhauser. Aplicaciones. Reactivos quirales. Su uso en la determinación de pureza enantiomérica. Uso de la RMN en la elucidación de estructuras orgánicas. Interpretación de espectros. Aplicaciones cuantitativas.

VIGENCIA AÑOS

2022

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

3/5

BAHIA BLANCA

ARGENTINA

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

PROGRAMA DE: QUIMICA ORGÁNICA ANALÍTICA

CÓDIGO: 6393

ÁREA NRO: II

PROGRAMA DE TRABAJOS PRÁCTICOS

Resolución de problemas para la elucidación de estructuras de moléculas orgánicas. Aplicación de cada una de las espectroscopias desarrolladas en la asignatura. Resolución de problemas con combinación de métodos.

METODOLOGÍA DE LA ENSEÑANZA

La asignatura es de carácter teórico. Las clases se desarrollan con la asistencia de medios audiovisuales. Estas clases se complementan con la resolución de problemas en los que se aplican los métodos espectroscópicos estudiados en la elucidación de estructuras de compuestos orgánicos.

FORMA DE EVALUACIÓN

La evaluación se realiza a través de exámenes parciales por sumatoria de puntos.

El cursado implica rendir tres parciales que incluyen sólo resolución de problemas. El puntaje global mínimo para el cursado es de 180 puntos, exigiéndose un mínimo de 60 puntos en el tercer parcial, el cual involucra todas las espectroscopias estudiadas. Si el alumno sumó entre 140 y 180 puntos, puede acceder a un examen recuperatorio general el cual es aprobado con un puntaje de 60 puntos.

La asignatura se puede promocionar rindiendo, además de los tres parciales mencionados, tres exámenes teóricos. Junto con el primer parcial se rinde un examen teórico de EM; con el segundo parcial un examen teórico de IR y, un examen teórico final de RMN, luego de aprobar el tercer parcial.

VIGENCIA AÑOS

2022

BIBLIOGRAFÍA**Bibliografía General**

1. L.D. Field, H.L. Li, A. M. Magill, « Organic structures from spectra ». John Wiley & Sons. 2020
2. M. Hesse, H. Meier y B. Zeeh, "Métodos espectroscópicos en Química Orgánica" Síntesis 1999
3. K. Feinstein, K. "Guide to spectroscopic identification of organic compounds". CRC Press. 2018
4. B. Faust, N. Johnston, J., & Reed, N. "Ultraviolet/visible spectroscopy. Modern Chemical Techniques", Royal Society of Chemistry, 102-103. 1997

Bibliografía Especial**Espectrometría de Masas**

1. J.T. Watson, J. T., O. D. Sparkman, O. D. "Introduction to mass spectrometry. Instrumentation, applications, and strategies for data interpretation" John Wiley & Sons. 2007
2. C. G. Herbert, C. G., R. A. Johnstone, R. A. "Mass spectrometry basics" CRC press. 2002
3. O. R. Gottlieb, R. Braz Filho "Introducción a la espectrometría de masa de sustancias orgánicas", Monografías científicas. Serie de química. 2000
4. J.H. Gross, J. H. "Mass spectrometry: a textbook", Springer Science & Business Media. 2006.

Espectroscopia Infrarroja

1. R. Gómez, R. Murillo. "Espectroscopia infrarroja". Universidad Nacional Autónoma de Mexico. 2006
2. J.M. Thompson, "Infrared spectroscopy". Jenny Stanford Publishing. 2018
3. Y. Ozaki, C. Huck, S. Tsuchikawa, S. B. Engelsen, (Eds.) "Near-Infrared Spectroscopy: Theory, Spectral Analysis, Instrumentation, and Applications". Springer. 2021
4. N. Colthup, "Introduction to infrared and Raman spectroscopy". Elsevier. 2012
5. A. Fried, D. Richter, "Infrared absorption spectroscopy". Analytical Techniques for Atmospheric Measurement. 2006.
6. J. Ortega, M. Blanco Fernández, "Identificación de compuestos orgánicos por espectroscopía infrarroja". Centro de Estudios y Experimentación de Obras Públicas. 1983

VIGENCIA AÑOS

2022

BAHIA BLANCA

ARGENTINA

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

PROGRAMA DE: QUIMICA ORGÁNICA ANALÍTICA

CÓDIGO: 6393

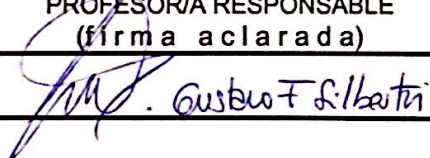
ÁREA NRO: II

Resonancia Magnética Nuclear

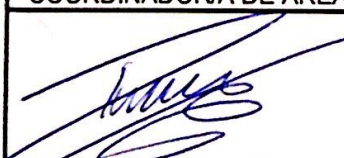

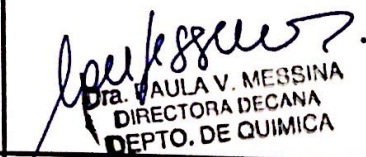
1. S. K. Bharti, E. Roy. "Quantitative ¹H NMR spectroscopy. TrAC Trends in Analytical Chemistry". 2012
2. J. Keeler, "Understanding NMR Spectroscopy" John Wiley & Sons. 2011
3. R. Contreras. "High Resolution NMR Spectroscopy: Understanding Molecules and their Electronic Structures" Newnes. 2013
4. J.A. Iggo, K. Luzyanin "NMR spectroscopy in inorganic chemistry". Oxford University Press. 2020.

Bibliografía en Internet

1. Virtual textbook of Organic Chemistry, Spectroscopy,
<https://www2.chemistry.msu.edu/faculty/reusch/VirtTxtJml/Spectrpy/spectro.htm#intro>
2. J. P. Hornak The Basics of NMR,
<http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/bnmr.htm>
3. Nuclear Magnetic Resonance (NMR) Spectroscopy
<https://www.chem.ucalgary.ca/courses/351/Carey5th/Ch13/ch13-nmr-1.html>

AÑO	PROFESORA/A RESPONSABLE (firma aclarada)	AÑO	PROFESORA/A RESPONSABLE (firma aclarada)
2022	 Pablo G. del Rosso		

V I S A D O

COORDINADOR/A DE AREA	SECRETARIO/A ACADÉMICO/A	DIRECTOR/A DECANO/A
 Darío Gerbino	 Dr. PABLO G. DEL ROSSO SECRETARIO ACADEMICO DEPTO. DE QUIMICA	 Dra. PAULA V. MESSINA DIRECTORA DECANO DEPTO. DE QUIMICA
FECHA:	FECHA:	FECHA: