

<b>UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR</b>					1 5		
BAHIA BLANCA			ARGENTINA				
<b>DEPARTAMENTO DE: QUIMICA</b>							
<b>PROGRAMA DE: QUIMICA ORGANICA AVANZADA</b>					CODIGO: 6389		
					AREA NRO: II		
H O R A S D E C L A S E					PROFESOR RESPONSABLE		
T E O R I C A S			P R A C T I C A S				
Por semana		Por cuatrimestre		Por semana		Alicia Beatriz Chopa	
4		60		4			60
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			
Química Orgánica II Fisicoquímica General				-----			
<b>DESCRIPCION</b>							
<p>La asignatura tiene como objetivo dar al alumno las armas mínimas necesarias para la elucidación de estructuras de moléculas orgánicas a través de reacciones químicas y de sus características espectroscópicas, además de dar las bases para el uso de Cromatografía en Fase Gaseosa y Líquida de Alta Performance en la separación de sustancias orgánicas.</p> <p>En ella se desarrollan las bases teóricas de espectroscopías de absorción (Ultravioleta, Infrarrojo, Resonancia Magnética Nuclear) y de Espectrometría de Masas. Por otra parte se desarrollan temas relacionados con técnicas cromatográficas actuales, con el objeto de brindar criterios fundamentales en el uso de dichas técnicas.</p> <p>El desarrollo de las clases prácticas coloca al alumno frente a problemas reales de laboratorio, los cuales pueden ser resueltos en base a los conocimientos adquiridos. Mediante la resolución de un número de problemas el alumno se introduce en el campo de la elucidación de estructuras orgánicas a través del uso de técnicas espectroscópicas combinadas</p>							
<b>PROGRAMA SINTETICO</b>							
<p>ESPECTROMETRIA DE MASAS. Fundamento teórico. Aplicaciones. (Tema 1)</p> <p>ESPECTROSCOPIA INFRARROJA. Teoría. Aplicaciones. (Tema 2)</p> <p>ESPECTROSCOPIA DE RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR. Propiedades magnéticas de los núcleos. Teoría. Desplazamiento químico. Multiplicidad de señales. <sup>1</sup>H y <sup>13</sup>C RMN. Características. Aplicaciones (Tema 3)</p> <p>ESPECTROSCOPIA ULTRAVIOLETA Y VISIBLE. Niveles energéticos moleculares. Teoría. Aplicaciones. (Tema 4).</p> <p>CROMATOGRAFIA. Fundamentos teóricos (Tema 5)</p> <p>CROMATOGRAFIA EN FASE GASEOSA. Equipo. Columnas. Aplicaciones.(Tema 6)</p> <p>CROMATOGRAFIA LIQUIDA DE ALTA PERFORMANCE. Equipo. Columnas. Aplicaciones.(Tema 7)</p>							
VIGENCIA AÑOS	2011	2012	2013				

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR					2 5	
BAHIA BLANCA			ARGENTINA			
DEPARTAMENTO DE: QUIMICA						
PROGRAMA DE: QUIMICA ORGANICA AVANZADA				CODIGO: 6389		
				AREA NRO: II		
<b>PROGRAMA ANALITICO</b>						
<b>TEMA 1: Espectrometría de masa.</b>						
Fundamento. Equipo: producción de iones, separación y detección. Analizadores. Poder de resolución. Ión molecular, características. Pico base. Modos de fragmentación. Determinación de composición elemental. Importancia del M+1 y M+2. Reconocimiento de ión molecular. Ionización química. Regla del nitrógeno. Reordenamientos iónicos. Espectros de masa de: hidrocarburos saturados, no saturados y aromáticos. Alcoholes, aldehídos, cetonas, ésteres, etc. Identificación de compuestos desconocidos. Análisis de mezclas.						
<b>TEMA 2: Espectroscopía Infrarroja.</b>						
Origen del espectro infrarrojo. Vibración de una molécula biatómica heteronuclear. Rotación y vibración de moléculas biatómicas. Espectros de vibración-rotación. Determinación de frecuencias. Espectros de moléculas poliatómicas. Vibraciones normales. Bandas características o frecuencias de grupo. Factores que influyen. Tablas de correlación. Análisis de las mismas. Aplicaciones de la espectroscopía infrarroja. Análisis cuali y cuantitativo. Diagnóstico estructural.						
<b>TEMA 3: Espectroscopía de resonancia magnética nuclear.</b>						
Propiedades magnéticas de los núcleos. Número de espín. Momento magnético. Distribución de la carga nuclear. Momento cuadrupolar. Orientación de los núcleos en un campo magnético. Distribución en niveles de energía. Movimiento precesional. Frecuencia de resonancia. Desplazamiento químico. Unidades. Desplazamiento químico en <sup>1</sup> H. Mecanismos de protección y desprotección electrónica. Circulaciones electrónicas. Uso de Tablas de predicción. Multiplicidad de las señales. Interacciones espín-espín. Constantes de acoplamiento. Protones intercambiables. Efecto de la concentración y temperatura. Desplazamiento químico de <sup>13</sup> C. Factores que lo afectan. Uso de Tablas. Aplicación de pulsos. Transformada de Fourier. Doble resonancia. La Resonancia Magnética Nuclear en la resolución de problemas de estructura, configuración y conformación.						
<b>TEMA 4: Espectroscopía ultravioleta y visible.</b>						
Niveles electrónicos. Regiones: UV cercano, UV lejano, Visible. Tipos de electrones excitables. Transiciones electrónicas: permitidas y prohibidas. Moléculas y absorción. Cromóforos, auxocromos. Sistemas moleculares. Cromóforos aislados, acumulados, conjugados. Sistemas con grupos auxocrómicos. Compuestos aromáticos. Efecto de la sustitución. Aplicaciones. Identificación de grupos funcionales y de compuestos; Reglas de Woodward-Fieser. Análisis cuantitativo.						
VIGENCIA AÑOS	2011	2012	2013			

<b>UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR</b>			3 5		
BAHIA BLANCA		ARGENTINA			
<b>DEPARTAMENTO DE:</b> QUIMICA					
<b>PROGRAMA DE:</b> QUIMICA ORGANICA AVANZADA			CODIGO: 6389		
			AREA NRO: II		
<p><b>TEMA 5: Cromatografía.</b> Fundamentos teóricos. Clasificación. Aspectos generales de cromatografía gaseosa y cromatografía líquida de alta presión. Eficiencia de la columna. Plato teórico. Altura de plato teórico (HETP). Retención. Factor de capacidad. Ecuación de Van Deemter, análisis de sus términos. Resolución. Control de la resolución.</p> <p><b>TEMA 6: Cromatografía gaseosa.</b> Equipo para cromatografía gaseosa. Gas portador (Carrier). Inyector. Columnas. Soportes sólidos. Fase líquida. Detectores. Registradores. Resolución en cromatografía gaseosa. Efecto de la temperatura. Cromatografía con temperatura isotérmica y temperatura programada. Análisis cualitativos y cuantitativos. Cromatografía gas-sólido. Aplicaciones.</p> <p><b>TEMA 7: Cromatografía líquida de alta presión (HPLC)</b> Equipo. Reservorio del solvente. Sistemas de bomba. Cámara de inyección. Columnas. Fases estacionarias. Colector de fracciones. Detectores. Cromatografía de intercambio iónico. Tipos de resinas. Cromatografía de filtración sobre geles. Aplicaciones.</p> <p><b>PRACTICAS DE LABORATORIO.</b> El trabajo de laboratorio es individual.</p> <p><b>IDENTIFICACION DE COMPUESTOS ORGANICOS.</b> Se lleva a cabo la identificación de muestras incógnitas siguiendo los pasos que se indican a continuación:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>a) Determinación del grado de pureza de la sustancia a través de sus constantes físicas: punto de fusión o punto de ebullición. Sustancias impuras se purifican por recristalización o destilación.</li> <li>b) Análisis preliminar: Estado físico, olor, color, ensayo de ignición.</li> <li>c) Análisis elemental cualitativo.</li> <li>d) Clasificación de los compuestos en familias orgánicas, por su grado de solubilidad en distintos medios.</li> <li>e) Preparación de derivados para confirmación de estructuras.</li> <li>f) Interpretación de los espectros IR, EM y de <math>^1\text{H}</math> y <math>^{13}\text{C}</math>-RMN de las sustancias incógnitas. Confirmación de estructuras.</li> </ul>					
VIGENCIA AÑOS	2011	2012	2013		

<b>UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR</b>				4 5	
BAHIA BLANCA		ARGENTINA			
<b>DEPARTAMENTO DE:</b> QUIMICA					
<b>PROGRAMA DE:</b> QUIMICA ORGANICA AVANZADA				CODIGO: 6389	
				AREA NRO: II	
<p>METODOS ESPECTROSCOPICOS PARA LA DETERMINACION DE ESTRUCTURAS ORGANICAS.</p> <p>Resolución de problemas para la elucidación de estructuras de moléculas orgánicas aplicando las distintas espectroscopías desarrolladas en el curso.</p> <p><b>Evaluación de Trabajos Prácticos</b></p> <p>Se debe aprobar:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Examen general del trabajo de laboratorio</li> <li>2. Dos exámenes parciales relacionados con elucidación de estructuras por métodos espectroscópicos, o en su defecto, los dos complementarios respectivos.</li> </ol> <p><b>Evaluación de clases teóricas.</b></p> <p>Aprobación de examen final que involucra el conocimiento de los fundamentos teóricos de los métodos espectroscópicos y cromatográficos involucrados en la asignatura.</p> <p><b>Metodología de la enseñanza</b></p> <p><b>Clases prácticas</b></p> <p>Trabajos de laboratorio y clase de consulta de resolución de problemas espectroscópicos.</p> <p><b>Clases teóricas</b></p> <p>Dictado de clases, dos días a la semana con un total de cuatro horas semanales</p> <p><b>BIBLIOGRAFIA.</b></p> <p><b>GENERAL.</b></p> <p>M.HESSE, H.MEIER y B.ZEEH,  " Métodos espectroscópicos en Química Orgánica", (1997)</p> <p>R.M.SILVERSTEIN, C.G.BASSLER y J.C.MORRILL  " Spectroscopic Identification of Organic Compounds", (1995)</p> <p>C.B.FAUST  " Modern Chemical Techniques" (1995)</p> <p>E. PRESTSCH, J.T.CLERC,  " Spectra interpretation of Organic Compounds" (1997)</p> <p><b>ESPECIAL.</b></p> <p>J. MORCILLO RUBIO  " Espectroscopía IR", (1998)</p> <p>N.B. COLTHUP, L.H. DALY y S.E. WIBERLEY,  " Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy" (1990)</p>					
VIGENCIA AÑOS	2011	2012	2013		

<b>UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR</b>			5 5
BAHIA BLANCA		ARGENTINA	
<b>DEPARTAMENTO DE: QUIMICA</b>			
<b>PROGRAMA DE: QUIMICA ORGANICA AVANZADA</b>		CODIGO: 6389	
		AREA NRO: II	
<p>J. THROCK WATSON          "Introduction to Mass Spectrometry" (1997)          O.R. GOTTLIEB, R.BRAZ FILHO, A. ARAGAO CRAVEIRO, J.W. de ALENAR,          "Introducción a la Espectrometría de Masas de sustancias orgánicas", (1983)          J. KEELER,          "Understanding NMR Spectroscopy", (2002)          H. GÜNTHER,          "NMR spectroscopy: basic principles, concepts and applications", 2°Ed., Eds. J.Wiley,          (1995)          W.KEMP,          "NMR in Chemistry. A Multinuclear Introduction", (1992)          H.H.JOFFÉ; M. ORCHIN          "Theory and applications of ultraviolet spectroscopy", (1970)          D. W. GRANT,          "Capillary Gas Chromatography", 1996.          P.J.BAUGH,          "Gas Chromatography. A practical approach", 1993.          H. Mc NAIR,          "Cromatografía de gases", 1981          H. Mc NAIR,          "Cromatografía líquida de alta presión", 1978          K. ROBARDS, P.R.HADDAD, P.E. JACKSON,          "Principles and practice of modern chromatographic methods", 1994</p> <p><b>Alguna bibliografía en Internet.</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>Virtual textbook of Organic Chemistry, Spectroscopy,  <a href="http://www2.chemistry.msu.edu/~reusch/VirtTxtJml/intro1.htm">http://www2.chemistry.msu.edu/~reusch/VirtTxtJml/intro1.htm</a></li> <li>The Basics of NMR, J. P. Hornak <a href="http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/bnmr.htm">http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/bnmr.htm</a></li> <li>NMR Tutorial, C. Hill  <a href="http://physchem.ox.ac.uk/~hill/tutorials/nm3_tutorial/nucspin/index.html">http://physchem.ox.ac.uk/~hill/tutorials/nm3_tutorial/nucspin/index.html</a></li> </ol>			
AÑO	PROFESOR RESPONSABLE (firma aclarada)	AÑO	PROFESOR RESPONSABLE (firma aclarada)
2011	Dra. Alicia B. Chopa		
2012	Dra. Alicia B. Chopa		
2013	Dra. Alicia B. Chopa		
<b>V I S A D O</b>			
COORDINADOR AREA	SECRETARIO ACADEMICO		DIRECTOR
	Dr. Mariano Garrido		Dra. Adriana G. Lista
FECHA:	FECHA:	FECHA:	Marzo 2017