

<b>UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR</b>					1 6	
BAHIA BLANCA			ARGENTINA			
DEPARTAMENTO DE: QUIMICA						
<b>PROGRAMA DE:</b>				CODIGO: 6393		
QUIMICA ORGANICA ANALITICA				AREA NRO: II		
H O R A S D E C L A S E				P R O F E S O R R E S P O N S A B L E		
T E O R I C A S		P R A C T I C A S		Dra. Alicia B. Chopa		
Por semana	Por cuatrimestre	Por semana	Por cuatrimestre			
4	40	3	40			
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		
PRACTICAS DE QUIMICA ORGANICA						
<b>DESCRIPCION</b>						
<b>Objetivo:</b>						
<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.</p> <p>Se desarrollan temas relacionados con la Espectrometría de Masas, Espectroscopía Infrarroja y Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear.</p> <p>Las clases prácticas implican la resolución de problemas que ilustran la utilidad de cada método en la dilucidación de estructuras.</p>						
<b>PROGRAMA SINTETICO</b>						
<p>Tema 1. <b><u>Espectrometría de Masas.</u></b> Fundamento. Ion molecular. Fragmentos. Aplicaciones. Interpretación de espectros.</p> <p>Tema 2. <b><u>Espectroscopía Infrarroja.</u></b> Fundamento. Espectro infrarrojo. Aplicaciones. Interpretación de espectros.</p> <p>Tema 3. <b><u>Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear.</u></b> Fundamento multinuclear. Desplazamiento químico. Acoplamiento. Resonancia Magnética de <math>^1\text{H}</math> y de <math>^{13}\text{C}</math>. Aplicaciones. Interpretación de espectros</p>						
VIGENCIA AÑOS	2010	2011				

<b>UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR</b>		2 6	
BAHIA BLANCA		ARGENTINA	
DEPARTAMENTO DE: QUIMICA			
<b>PROGRAMA DE:</b>		CODIGO: 6393	
QUIMICA ORGANICA ANALITICA		AREA NRO: II	
<b>PROGRAMA ANALITICO</b>			
<p><b>Tema 1. ESPECTROMETRIA DE MASAS (EM).</b> 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.</p> <p>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</p>			
<p><b>Tema 2. ESPECTROSCOPIA INFRARROJA.</b> 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.</p>			
<p><b>Tema 3. ESPECTROSCOPIA DE RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR.</b> 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.</p> <p>Equipos de onda continua y por pulsos. Sistema de coordenadas rotante. Tiempo de pulso. Angulo de pulso. Relajación del espín nuclear (<math>T_1</math>, <math>T_2</math>) Transformada de Fourier. FID.</p> <p>Desplazamiento químico. Unidades. Desplazamiento químico de <math>^1\text{H}</math>. Factores que lo afectan. Densidad electrónica, anisotropía. Desplazamiento químico de <math>^{13}\text{C}</math>. Factores que lo afectan. Predicción de desplazamiento químico: uso de tablas.</p> <p>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.</p> <p>Núcleos intercambiables. Efecto de la dilución y la temperatura. Congelamiento conformacional. RMN dinámica.</p> <p>Desacoplamiento espín-espín. Doble resonancia. Desacoplamiento homo- y heteronuclear. Efecto Nuclear Overhauser. Aplicaciones.</p> <p>Reactivos quirales. Su uso en la determinación de pureza enantiomérica.</p> <p>Uso de la RMN en la elucidación de estructuras orgánicas. Interpretación de espectros. Aplicaciones cuantitativas.</p>			
VIGENCIA AÑOS	2010	2011	

**UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR**

3  
6

BAHIA BLANCA

ARGENTINA

DEPARTAMENTO DE: QUIMICA

**PROGRAMA DE:**

CODIGO: 6393

QUIMICA ORGANICA ANALITICA

AREA NRO: II

**PROGRAMA DE TRABAJOS PRACTICOS**

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.

VIGENCIA AÑOS

2010

2011

**PROGRAMA DE:**

CODIGO: 6393

QUIMICA ORGANICA ANALITICA

AREA NRO: II

**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

2010

2011

**BIBLIOGRAFIA BASICA****Bibliografía General**

1. M.Hesse, H.Meier y B.Zeeh,  
"Métodos espectroscópicos en Química Orgánica" (1997)
2. R.M.Silverstein, C.G.Bassler y J.C.Morrill  
"Spectroscopic Identification of Organic Compounds" (1995)
3. C.B.Faust,  
"Modern Chemical Techniques" (1995)

**Bibliografía Especial****Espectrometría de Masas**

1. Gottlieb-Braz Filho  
"Introducción a la espectrometría de masa de sustancias orgánicas", (2000)
2. J. Throck Watson  
"Introduction to Mass Spectrometry" (1997),
3. J.R.Chapman  
"Practical Organic Mass Spectrometry" (1993)
4. F.W.McLafferty,  
"Interpretación de los espectros de masas", (1981)

**Infrarrojo**

1. J. Morcillo Rubio,  
"Espectroscopía IR", (1998)
2. N.B.Colthrup, L.H.Daly and S.E.Wiberley,  
"Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy"(1995)
3. J. Ortega, M.Blanco Fernández,  
"Identificación de compuestos orgánicos por espectroscopía infrarroja", (1983)
4. K.Nakanishi y P.Solomon,  
"Infrared Absorption Spectroscopy"(1974)

**Resonancia Magnética Nuclear**

1. J. Keeler,  
"Understanding NMR Spectroscopy", (2002)
2. H.Günther,  
"NMR Spectroscopy" (1994)
3. W.Kemp,  
"NMR in Chemistry. A Multinuclear Introduction"(1993)
4. Pál Sohár,  
"Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy" (1993)

**Alguna bibliografía en Internet.**

1. Virtual textbook of Organic Chemistry, Spectroscopy,  
<http://www2.chemistry.msu.edu/~reusch/VirtTxtJml/intro1.htm>
2. The Basics of NMR, J. P. Hornak <http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/bnmr.htm>
3. NMR Tutorial, C. Hill  
[http://physchem.ox.ac.uk/~hill/tutorials/nm3\\_tutorial/nucspin/index.html](http://physchem.ox.ac.uk/~hill/tutorials/nm3_tutorial/nucspin/index.html)

AÑO	PROFESOR RESPONSABLE (firma aclarada)	AÑO	(firma aclarada)
2010	Dra. Alicia Chopa		
2011	Dra. Alicia Chopa		
V I S A D O			
COORDINADOR AREA	SECRETARIO ACADEMICO	DIRECTOR DE DEPARTAMENTO	
	Dr. Mariano Garrido	Dra. Adriana G. Lista	
FECHA:	FECHA:	FECHA: Marzo 2017	