

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR						1/5
BAHIA BLANCA		ARGENTINA				
DEPARTAMENTO DE: QUÍMICA						
PROGRAMA DE: DETERMINACIÓN DE ESTRUCTURAS ORGÁNICAS POR MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS					CÓDIGO:	
					ÁREA 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 O R I C A S			P R A C T I C A S			
Por semana	Por Cuatrimestre	Por semana	Por cuatrimestre	Dr. Gustavo F. Silbestri		
2	32	3	48			
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		
QUIMICA ORGÁNICA IB						
DESCRIPCION/OBJETIVO:						
<p>La asignatura tiene como objetivo introducir al estudiante a los fundamentos del análisis espectroscópico y a la elucidación de estructuras orgánicas a partir de sus espectros como única herramienta, o mediante el uso combinado de las distintas espectrometrías.</p> <p>Incentivar al estudiante en la comprensión del significado de los espectros que examina aprovechando la información que se obtiene en el uso combinado de los mismos para llevar a cabo la elucidación de estructuras. Además, se pretende que, adquiera el suficiente conocimiento para diseñar la mejor manera de enfrentarse a un determinado problema de determinación estructural conociendo la información que proporciona o aporta cada tipo de espectro, dominando las aplicaciones y limitaciones de las diferentes técnicas espectroscópicas. En concreto, se desarrollan temas relacionados con técnicas espectroscópicas de absorción (Ultravioleta, Visible, Infrarrojo), Resonancia Magnética Nuclear y de Espectrometría de Masas.</p> <p>Las clases prácticas implican la resolución de problemas que ilustran la utilidad de cada método en la dilucidación de estructuras.</p>						
PROGRAMA SINTETICO						
TEMA 1: Espectrometría de Masas (EM). Fundamento. Ion molecular. Fragmentos. Aplicaciones. Interpretación de espectros.						
TEMA 2: Espectroscopia Infrarroja (IR). Fundamento. Espectro infrarrojo. Aplicaciones. Interpretación de espectros.						
TEMA 3: Espectroscopia ultravioleta-visible (UV-vis). Fundamento. Espectro UV-visible. Aplicaciones. Interpretación de espectros.						
TEMA 4: Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear (RMN). Propiedades magnéticas de los núcleos. Desplazamiento químico. Multiplicidad de señales. Resonancia Magnética de ¹ H y de ¹³ C. Aplicaciones. Interpretación de espectros.						
VIGENCIA AÑOS						

PROGRAMA DE:
DETERMINACIÓN DE ESTRUCTURAS ORGÁNICAS POR
MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS

CÓDIGO:

ÁREA NRO: II

PROGRAMA ANALITICO**TEMA 1: ESPECTROMETRIA DE MASAS (EM)**

Fundamentos. Interpretación del espectro de masa por impacto electrónico. Instrumentos. Análisis de masas y abundancias iónicas. Introducción de muestras. Sistema acoplado con cromatografía gaseosa. Sistema acoplado con cromatografía líquida de alta resolución. Determinación de peso y fórmula molecular. Composición elemental de iones. Isótopos estables. Poder resolutivo del espectrómetro de masa. El ion molecular. Importancia de picos. Mecanismos básicos de fragmentación iónica. Reacciones iniciadas en sitios radicales y cargados. Disociación de uniones sigma. Estructuras cíclicas. Reordenamientos. Series iónicas. Fragmentos neutros. Iones característicos. Métodos alternativos de ionización. Interpretación de espectros.

TEMA 2: ESPECTROSCOPIA INFRARROJA (IR)

Origen del espectro infrarrojo. Energía vibracional de una molécula. Vibraciones activas en el infrarrojo. Vibraciones fundamentales, sobretonos y de combinación. Instrumentación. Preparación de muestras. Posición de bandas y frecuencias. Absorciones características de grupos funcionales. 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 ULTRAVIOLETA-VISIBLE (UV-Vis)

Naturaleza de la radiación electromagnética. Niveles electrónicos. Electrones excitables. Transiciones electrónicas. Reglas de selección. Leyes de absorción de la luz. Espectros electrónicos de absorción y de emisión. Instrumentación. Preparación de muestras. Moléculas y absorción. Efectos estructurales. Absorciones características de compuestos orgánicos. Identificación de grupos funcionales. Reglas de Woodward-Fieser. Tablas de correlación. Aplicaciones en Química Orgánica.

TEMA 4: ESPECTROSCOPIA DE RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR (RMN)

El fenómeno de la RMN. Propiedades magnéticas de los núcleos. Spin nuclear y momento magnético. Distribución de niveles de energía. Relajación del spin nuclear. Instrumentación. Preparación de muestras. Desplazamiento químico. Unidades. Protección electrónica. Acoplamiento spin-spin. Multiplicidad de señales. Espectros de ^1H RMN. Núcleos equivalentes por desplazamientos químicos. Acoplamiento vecinal y geminal. Relación entre la constante de acoplamiento, estructura y estereoquímica de un compuesto: ecuación de Karplus. Acoplamiento a larga distancia. Acoplamiento de protones con otros núcleos. Desacoplamiento spin-spin. Núcleos intercambiables. Efecto de la dilución y la temperatura. RMN dinámica. Tablas de correlación. Interpretación de espectros. Doble resonancia y ^{13}C RMN. Efecto nuclear Overhauser. Desplazamiento químico de ^{13}C . Factores que lo afectan. Desacoplamiento fuera de resonancia. Desacoplamiento selectivo de protones. Tablas de correlación. Interpretación de espectros. Técnicas de RMN en dos dimensiones. Correlación en sistemas homonucleares. El experimento COSY. Correlación homonuclear de núcleos poco abundantes (^{13}C - ^{13}C), secuencias INADQUATE y ADEQUATE. Aplicaciones. Correlación en sistemas heteronucleares. Secuencias HSQC y HMQC. Correlación H-X a través de varios enlaces: HMBC. Correlaciones a través del espacio. Efecto Overhauser Nuclear transiente. Relación con las distancias internucleares. Espectros NOESY y ROESY. Uso de la RMN en la elucidación de estructuras orgánicas. Interpretación de espectros. Aplicaciones cuantitativas.

PROGRAMA DE:DETERMINACIÓN DE ESTRUCTURAS ORGÁNICAS POR
MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS

CÓDIGO:

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. Uso combinado de la información espectral para la identificación de compuestos orgánicos haciendo uso además de información proveniente de otros métodos físicos (puntos de fusión, índice de refracción, solubilidad, dispersión óptica rotatoria, acidez y basicidad, momento dipolar, etc.) y de índole química (reacciones de caracterización de grupos funcionales, preparación de derivados, degradación, etc.).

METODOLOGÍA DE LA ENSEÑANZA

Se trata de una asignatura teórico / práctica, en la cual, se dictan clases a cargo del Profesor, las que se intercalan con clases de resolución de problemas, a cargo del jefe de Trabajos Prácticos, en los que se aplican los métodos espectroscópicos estudiados en la elucidación de estructuras de compuestos orgánicos. Las clases se desarrollan con la asistencia de medios audiovisuales.

Se pretende encarar el proceso de enseñanza-aprendizaje de modo que se promueva la participación de los alumnos, estimulando su interés y motivación. De la misma se trabajará en el desarrollo de sus actitudes, capacidades y destrezas. Para ello, las clases teóricas, así como las prácticas, se desarrollan de manera interactiva, de modo tal que los estudiantes tengan participación real, ya sea a través de interrogantes planteados por el profesor, o a través de la exposición de temas preparados por los alumnos. Para lograr la participación activa de las propuestas en clase, el estudiante cuenta con los contenidos teóricos grabados y disponibles antes de comenzar cada tema.

La asignatura tiene una carga horaria de 5 horas semanales (80 horas totales) de las cuales 3 horas semanales (48 horas totales) son dedicadas a resolución de problemas de cada espectrometría y combinados. Las 2 horas semanales restantes (32 horas totales) corresponden al dictado de clases teóricas donde se imparten los fundamentos de cada una de las técnicas enunciadas en el programa analítico.

FORMA DE EVALUACIÓN

El cursado implica rendir dos parciales que incluyen sólo resolución de problemas. El puntaje global mínimo para el cursado es de 120 puntos, exigiéndose un mínimo de 60 puntos en el segundo parcial, el cual involucra todas las espectroscopias estudiadas. Si el alumno sumó entre 90 y 120 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 parciales mencionados, dos exámenes teóricos. Junto con el primer parcial se rinde un examen teórico de EM e IR; y con el segundo parcial un examen teórico de UV-Vis y de RMN.

Teniendo en cuenta el número reducido de alumnos se pretende llevar a cabo una evaluación constante a lo largo del curso, la que será tenida en cuenta en la calificación final.

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR						4/5
BAHIA BLANCA		ARGENTINA				
DEPARTAMENTO DE: QUÍMICA						
PROGRAMA DE: DETERMINACIÓN DE ESTRUCTURAS ORGÁNICAS POR MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS					CÓDIGO:	
					ÁREA NRO: II	
BIBLIOGRAFÍA						
Bibliografía General						
1. M. Hesse, H. Meier y B. Zeeh "Métodos espectroscópicos en Química Orgánica", 2ª edición (2005)						
2. R.M. Silverstein, C.G. Bassler y J.C. Morrill "Spectroscopic Identification of Organic Compounds" (2015)						
3. C.B. Faust, "Modern Chemical Techniques" (1995)						
Bibliografía Especial						
ESPECTROMETRIA 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)						
ESPECTROSCOPIA INFRARROJA						
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)						
ESPECTROSCOPIA DE RESONANCIA MAGNETICA 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)						
VIGENCIA AÑOS						

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR		5/5	
BAHIA BLANCA		ARGENTINA	
DEPARTAMENTO DE: QUÍMICA			
PROGRAMA DE: DETERMINACIÓN DE ESTRUCTURAS ORGÁNICAS POR MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS		CÓDIGO:	
		ÁREA NRO: II	
<p>ALGUNA BIBLIOGRAFIA EN INTERNET</p> <p>1. Virtual textbook of Organic Chemistry, Spectroscopy, http://www2.chemistry.msu.edu/~reusch/VirtTxtJml/intro1.htm</p> <p>2. The Basics of NMR, J. P. Hornak http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/bnmr.htm</p> <p>3. NMR Tutorial, C. Hill http://physchem.ox.ac.uk/~hill/tutorials/nm3_tutorial/nucspin/index.html</p>			
AÑO	PROFESOR/A RESPONSABLE (firma aclarada)	AÑO	PROFESOR/A RESPONSABLE (firma aclarada)
	Dr. Gustavo F. Silbestri		
V I S A D O			
COORDINADOR/A DE AREA	SECRETARIO/A ACADÉMICO/A	DIRECTOR/A DECANO/A	
FECHA:	FECHA:	FECHA:	