Ministerio de Cultura y Educación
Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Química Bioquímica y Farmacia
Departamento: Quimica
Area: Qca Organica

(Programa del año 2015)
(Programa en trámite de aprobación)
(Presentado el 27/06/2015 19:40:34)

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
QUIMICA ORGANICA III	LIC. EN QUIMICA	5/04	2015	1° cuatrimestre

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
ARDANAZ, CARLOS ENRIQUE	Prof. Responsable	P.Tit. Exc	40 Hs
BORKOWSKI, EDUARDO JORGE	Prof. Colaborador	P.Asoc Exc	40 Hs
ROSSOMANDO, PEDRO CLEMENTE	Prof. Co-Responsable	P.Tit. Exc	40 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	**Teóricas**	**Prácticas de Aula**	**Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.**	**Total**
120 Hs	Hs	Hs	Hs	8 Hs

Tipificación	Periodo
C - Teoria con prácticas de aula	1º Cuatrimestre

Duración			
Desde	**Hasta**	**Cantidad de Semanas**	**Cantidad de Horas**
16/03/2015	26/06/2015	15	120

IV - Fundamentación

Las metodologías espectrométricas que se empezaron a descubrir a desde finales del siglo XVIII, y se fundamentaran durante la segunda mitad del siglo XIX con los descubrimientos de Maxwell, y otros, y se hubieron completado a inicios del siglo XX, con las teorías atómicas, cuánticas se han afirmado y desarrollado muy extensamente en la segunda mitad del siglo XX,con los avances tecnológicos que llevaron a ser aplicables equipos que antes eran juguetes de laboratorio, haciendo una revolución en el modo de trabajo de laboratorio en cuento a la mecánica de encarar la dilucidación de una estructura, ya no tanto por meros métodos químicos sino por registros espectrales combinados extensivos, tanto de Infrarojo, Ultravioleta, RX, Resonancia Magnética Nuclear Mono y Bidimensional de 1H y 13C, de imágenes y la Espectrometría de Masa, de Impacto Electrónico, ESI, APCI, MSn, y de imágenes, al punto que se han hecho imprescindibles y cada vez mas extensa la lista de metodologías espectrométricas que llegan tanto a la intimidad de las moléculas aisladas como de su presencia en tejidos vivos, registrando información valiosísima e imprescindible para todo tipo de decisiones a tomar, tanto desde la salud de los seres vivos como de la calidad de los productos industriales, ó la investigación arqueológica ó forense, así como en la indagatoria sobre el universo que nos rodea y su composición.

V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

OBJETIVO GENERAL:
Lograr un adecuado nivel de conocimientos en los principios de las técnicas de dilucidación estructural combinadas, alcances y limitaciones instrumentales.
OBJETIVO PARTICULAR: Alcanzar un correcto manejo de las notaciones y representación de los fenómenos que se producen en los instrumentos espectrométricos, modos operativos, esquemas de interpretación de espectros, información que

se puede obtener de la determinación estructural, y finalmente la utilidad y aplicación de las técnicas combinadas en controles de alimentos, medicamentos, peritajes, pesticidas, productos industriales y o naturales, etc

VI - Contenidos

TEMA 1: ESPECTROSCOPÍA de ULTRAVIOLETA y VISIBLE: Generalidades. Transiciones electronicas. Diversos

tipos; diagramas de energía. Intensidad de absorción. El efecto de conjugación. Distintos tipos. Correlaciones empíricas en sistemas conjugados. Dienos y polienos. Enonas y polienonas. Compuestos aromáticos. Absorción e intensidad. Cálculo de las mismas. Sistemas aromáticos de conjugación extendida. Compuestos modelo. Factores que afectan los espectros de UV-VIS.-

TEMA 2 : ESPECTROSCOPÍA DE INFRARROJO. Generalidades. Modos normales de vibración. El espectro rotacional-vibracional. Absorción y momento dipolar. Sobretonos y bandas de combinación. Origen de las frecuencias de grupo. El efecto de masa y fuerza de enlace. Grupos osciladores individuales y multiples. FT-IR, Generalidades. Aplicaciones.-

TEMA 3: ESPECTROSCOPÍA DE INFRARROJO. Frecuencias de grupo. Efectos de ángulos de enlaces. Cicloalquenos, cetonas cíclicas, lactonas y otros. Generalizaciones. Influencias de efectos inductivos y mesomeros. Aplicaciones generales para distintos tipos de compuestos orgánicos. Estudio de uniones puente de hidrógeno.

TEMA 4: ESPECTROSCOPÍA DE INFRARROJO. Análisis espectral de IR. Aplicaciones estructurales en compuestos orgánicos. Influencia de la temperatura, estado físico, concentración y disolventes en los espectros de IR. Uso del IR con fines de dilucidación estructural. Uso de bibliografia. Problemas de aplicación.

TEMA 5: ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE HIDROGENO-1. El fenómeno de RMN. Ecuaciones básicas. Fenómenos de relajación. Diversos tipos. Representación de los espectros. Manejo de las muestras. Disolventes. Corrimiento químico. Formas de expresarlo. Referencias. Mecanismos de protección y desprotección. Estudio detallado de diversos tipos de mecanismos. Ejemplos de los mismos en diversas estructuras orgánicas.

TEMA 6: ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE HIDROGENO-1. Interacciones espín-espín. Principio de las mismas. Equivalencia química y magnética de los núcleos. Constantes de acoplamiento. Diversos tipos. Variación de las mismas en función de la geometría y sustituyentes. Estudio particular de acoplamientos geminales, vecinales, en sistemas aromáticos y hetericíclicos, en sistemas distantes y con otros núlceos.

TEMA 7 : ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE HIDROGENO-1. Interacciones espín- espín. Espectros de primer orden. Expresión de los parámetros de RMN para diversos casos. Espectros de orden superior. Reconocimiento de los mismos. Estudio particular de diferentes casos. Obtención de los valores de corrimientos y constantes de acoplamiento. Simplificación espectral. Doble resonancia. Efecto NOE. Generalidades y aplicaciones.

TEMA 8 : ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE HIDROGENO-1. Reactivos de desplazamiento paramagnético. Interacción de nucleófilos con Lantánidos. Equilibrios. Determinación de la configuración molecular a partir de los corrimientos inducidos por lantánidos. Diversos métodos de cálculos. Ajustes por métodos gráficos.

TEMA 9 : ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE HIDROGENO-1. Aspectos dinámicos en RMN. Intercambio químico. Efectos de la Temperatura y Disolventes. Estudios conformacionales. RMN a temperatura variable. Estereoquímica. Determinación de la misma en función de corrimientos químicos y constantes de acoplamiento. Resonancia de otros núcleos . Generalidades y ejemplos.

TEMA 10 : ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE HIDROGENO-1. Interpretación de espectros de RMN de compuestos orgánicos en general. Aplicaciones estructurales particulares en el campo de esteroides, alcaloides, flavonoides, terpenoides y polímeros. Manejo de tablas y bibliografía de RMN. Problemas combinados con información química. Estudios cinéticos por RMN. Análisis cuantitativo por RMN. Ejemplos.

TEMA 11 : ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE CARBONO -13. Generalidades. Comparación con el caso de RMN de H-1. Parámetros espectrales. Estudio de factores que afectan al corrimiento químico. Correlaciones empíricas y efecto de los sustituyentes. Constantes de acoplamiento . Diversos tipos. Técnicas de asignación de las señales en RMN de Carbono-13. Desacoplamientos heteronucleares parciales y totales. Ejemplos.

TEMA 12 : ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE CARBONO -13. Técnicas de marcado isotópico para interpretación de espectros de RMN. Reactivos de desplazamiento paramagnético.

Aplicaciones de C-13. Distintos tipos y aplicaciones estructurales. Técnicas de inversión-recuperación y desacoplamiento selectivo de hidrógeno.
TEMA 13 : ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE CARBONO -13. Aplicaciones estructurales. Estudios conformacionales y configuracionales. Aplicaciones particulares sobre compuestos orgánicos sencillos y en el campo de esteroides, alcaloides , flavonoides, terpenoides. Manejo de tablas. Problemas combinados con otras técnicas espectrométricas . Espectrometría de RMN: Metodología de Pulsos y Transformadas. Instrumentación. Efecto Nuclear de Ovehauser. Desacoplamiento pulsado por compuertas. Relajación en RMN. Medición de tiempos de relajación . Técnicas mono y bidimensionales. NOE diferencial, SPI, INEPT, DEPT, H,H COSY, H,C COSY, COLOC, INADEQUATE, y NOESY.
TEMA 14 : ESPECTROMETRÍA DE MASAS. Fundamentos y ecuaciones básicas. Resolución. Tipos de espectrómetros de masas. Magnéticos, Dinámicos . Producción de iones gaseosos. Uso y limitaciones de fuentes por impacto electrónico. Ionización. Técnicas de alto vacío en EM. Introducción de muestras. Casos de sólidos, líquidos y gases. Ionización de moléculas lábiles. Ionización química, ESI., APCI., FAB., otras modalidades de ionización. Iones Metaestables. Formas de representación de los EM.
TEMA 15 : ESPECTROMETRÍA DE MASAS. Iones Moleculares, fragmentos, isotópicos, múltiplemente cargados, de reordenamiento y metaestables. Reacciones ión-molécula y fragmentaciones inducidas por colisión. Iones metaestables. Propiedades de los mismos. Diversos tipos de espectros de energía, su interpretación y utilidad estructural. Estructura de los iones gaseosos en EM. Abundancias. Marcado isotópico y transformaciones químicas. Estudios genético por técnicas vinculadas de registro. Aplicaciones de EM inorgánicas. Análisis de trazas.
TEMA 16 : ESPECTROMETRÍA DE MASAS. Fragmentaciones y reordenamientos en EM de compuestos orgánicos. Fragmentaciones simples. Tipos reglas de descomposición, generalización. Uso de los efectos derivados de desplazamientos electrónicos en la predicción de rupturas. Fragmentaciones no típicas. Reordenamientos. Diversos tipos. Análisis particular de transposiciones intramoleculares y de eliminación de fragmentos neutros. Procesos en varias etapas y concertados. Migración de grupos funcionales. Expansión de anillos. Aspectos estereoquímicos en EM. Ejemplos. Localización de la carga en EM. Programas de fragmentación teórica y predicción estructural.
TEMA 17 : ESPECTROMETRÍA DE MASAS. Interpretación de los EM de compuestos orgánicos. El ión molecular. Técnicas de determinación y su composición por estudios isotópicos de alta resolución. Aproximaciones empíricas y por comparación. Detección de grupos funcionales. Caso de moléculas mono y polifuncionales sencillas. Uso combinado de información en EM, RMN, e IR en la dilucidación estructural. Estudio particular de EM en el campo de compuestos heterocíclicos y de interés biológico. Esteroides, terpenoides. Análisis de mezclas.-
TEMA 18 : ESPECTROMETRÍA DE MASAS. Sistemas combinados de cromatografía de gases-EM. Aplicaciones particulares de CG-EM. Detección de rutas de fragmentación experimentalmente y teóricamente, Aplicaciones en control de calidad, industria de alimentos, pesticidas, estudios forenses y ecológicos.-
TEMA 19 : SIMULACIÓN Y PREDICCIÓN DE ESPECTROS DE RMN, Simulación por aproximación. Software utilizado. Simulación basada en cálculos teóricos. Fundamentos. Métodos de cálculo del tensor de apantallamiento. Software utlizado. Aplicaciones.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

Resolución de aproximadamente cien (100) problemas de dilucidación estructural, empleando información de UV, IR, RMN-H-1, RMN-C-13, RMN Técnicas Bidimensionales, EM e información química. Con eventulales asistencia clase demostrativa de empleo de los equipos y su funcionamiento en caso de estar operativos.

VIII - Regimen de Aprobación

Se requerirá completar un 80 % de la resolución de los problemas planteados en aula y la aprobación de dos examinaciones parciales,debiendo para los alumnos promocionales obtener una nota de 7 en cada examinación , para obtener la promoción , en los casos en que correspondiere, para los alumnos que solo la cursen como regulares, deberán promediar una nota de 7 entre
ambas examinaciones, y rendir el exámen final. En caso de desaprobar las examinaciones parciales ó no poderlas rendir por razones de fuerza mayor, se brindará la oportunidad de recuperar hasta en dos oportunidades más, hacia el final de la cursada. De ser posible de asignar al inicio de la cursada la realización de seminarios, los mismos deberán ser presentados y defendidos hacia el final de la cursada, para completar las actividades académicas.Se aceptan alumnos libres, los mismos deberán rendír para aprobar un exámen escrito, debiendo obtener una nota de siete .

IX - Bibliografía Básica

[1] - ADAMS, Robert P., Identification of Essential Oil Components by Gass Chromatography Mass. Spectroscopy, Allured Publishing Corporation Firth edition 1995, and Fourth edition 2007.
[2] - Central Institute of Nutrition and Food Research, Mass Spectra of Volatiles in Food, SpecData, 2nd Edition, (2003)
[3] - BREITMAIER E. Structure elucidation by NMR in Organic Chemistry. Wiley. 3rd Ed. 2002
[4] - BUDZIKIEWICZ-DJERASSY-WILLIAMS; Interpretation of Mass Spectra of Organic Compounds; H.Day, 1965.-
[5] - Claridge T. D. W. High-resolution NMR Techniques in Organic Chemistry. Pergamon. 2nd Ed. 2010.
[6] - COLTHUP, Daly and Wiberley; Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy; Acad.Press.-
[7] - CRESWELL; Spectral Analysis of Organic Compounds; Burgess, 1972.-
[8] - DIBBERN, H.W; MULLER,WIRBITZKI:, UV and IR Spectra of Pharmacetical substances, Cantor Verlag 2002.-
[9] - DUDDECK H., DIETRICH W., TOTH G. Structure Elucidation by Modern NMR. A workbook. Third, Revised and Updated Edition. 1998 by Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
[10] - DYER; Aplications of Absorption Spectroscopy of Organic Compounds; Prentice Hall.-
[11] - GOTTLIEB; Introducción a la Espectrometría de Masas de Substancias Orgánicas; Monografía de OEA.-
[12] - HAMMING-FOSTER; Interpretation of Mass Spectra of Organic Compounds ; Acad.Press, 1972.-
[13] - JACOBSEN Neil E,.NMR SPECTROSCOPY EXPLAINED Simplified Theory, Applications and Examples for Organic Chemistry and Structural Biology.2007 by John Wiley & Sons, Inc
[14] - LEVY C. and NELSON G. L.; Resonancia Magnética Nuclear de C-13 para Químicos Orgánicos; E.Bellaterra, 1976.-
[15] - MARTIN G. and ZEKTZER A. Two-Dimensional NMR. Méthods for establishing molecular connectivity. A chemist guide to experiment selection, performance and interpretation. VCH publ. 1988
[16] - Mc LAFFERTY; Interpretación de los Espectros de Masas; Ed. Reverté, 1969.-
[17] - MORRISON; Organic Chemistry; Allyn and Bacon, 1971.-
[18] - NAKANISHI; Infrared Absorption Spectroscopy; Holden Day.-
[19] - NEUHAUS D. and WILLIAMSON M. The Nuclear Overhauser Effect. In structural and conformational análysis. VCH publ., Inc. 1989
[20] - OBERACHER, Herbert; Wiley Registry of Tandem Mass Spectral Data: MS for ID (2012).
[21] - PASTO-JOHNSON; Organic Structure Determination; Prentice Hall.-
[22] - RAO; Chemical Aplications Infrared Spectroscopy; Acad.Press.-
[23] - SEIBL J.; Espectrometría de Masas; Ed. Alhambra, 1973.-
[24] - SHRINER; The Systematic Identification of Organic Compounds; Willey, 1970.-
[25] - SILVERSTEIN-BASSLER; Spectrometric Identification of Organic Compounds; J.Wiley, 1994.-
[26] - Skoog, Douglas A., 2008 Principios de Análisis Instrumental.
[27] - WILLIAMS-FLEMING; Métodos Espectroscópicos en Química Orgánica; Urmo, 1968.-

X - Bibliografia Complementaria

[1] BAHCCA-WILLAMS; Aplications of NMR Spectroscopy in Organic Chemistry; Holden Day,1966.-
[2] BEL J.R. ; Introductory FT-Spectroscopy ; Academic Press 1972.
[3] Página 4
[4] BRLETMAZER and VOELTER; Carbon-13 NMR Spectroscopy; Monographs in Modern Chemistry; V.5; Ebel, 1978.-
[5] BRUGEL; An Introduction to Infrared Spectroscopy; Matheum.
[6] BUDZIKIEWICZ-DJERASSY-WILLIAMS; Structure Elucidation of Natural Products by Mass Spectrometry; V1 y V.2;
[7] Holden Day, 1964.-
[8] CHAPMAN J.R.; Practical Organic Mass Spectrometry ; John Wiley 1989.
[9] COOKS, BEYNON, CAPRIOLI, LESTER; Metastable Ions; Elsevier, 1973.-
[10] DEROME E.D.; Modern MNR Techniques for Chemistry Research, Vol. 6; Pergamon Press 1988.
[11] DIEHL; NMR, Basic Principles; 1971.-
[12] EMSLEY; High Resolution NMR Spectroscopy; V.1 y V..2; Acad. Press, 1967.-
[13] FEENEY J. ; Carbon-13 NMR Spectroscopy; Heyden, 1976.-
[14] JACKMAN-STERNELL; Aplications of NMR in Organic Chemistry; Acad.Press, 1969.-
[15] JOHNSTONE R. A.W.; Mass Spectrometry; V.3; The Chemical Soc., Burlington House, 1

[16] MATHIENSON; Interpretation of the Ultraviolet Spectra; Acad. Press,1968.-
[17] Mc FADDEN; Techniques of Combined Gas Chromatography/ Mass Spectrometry; W. Interscience, 1973.-
[18] PHILIP and BUNNELL; Carbon 13 NMR Organic Spectral Problems; J. Wiley, 1979.-
[19] POUCHERT; The Aldrich Library of NMR Spectra; Aldrich, 1974.-
[20] REED; Apliccations of the Mass Spectroscopy to Organic Chemistry; Acad. Press, 1966.-
[21] ROBERTS; Nuclear Magnetic Resonance; Mc Graw Hill, 1959.-
[22] SCHEINMAN; An Introduction to Spectroscopy Methods; V.1 y V.2; Acad.Press, 1970.-
[23] SCOTT; Interpretation of the Ultraviolet Spectra; Acad. Press, 1964.-
[24] SIEVERS; Nuclear Magnetic Resonance Shift Reagents; Acad. Press, 1973.-
[25] STOTHERS J. B.; Carbon-13 NMR Spectroscopy, in Organic Chemistry; V. 24; A. Press 1972.-
[26] TROST; Problems in Spectroscopy; Benjamin, 1967.-
[27] WEISSBERGER; Techniques in Organic Chemistry, V.1, 6, 9, y 11. Interscience 1967.-
[28] WERLI F.W.; MARCHAND A.P., WERLI S. ; Interpretation of C-13 MNR ; Spectra ; John Wiley 1983.
[29] WEST, A. R.; Advances in Mass Spectrometry, V.6; Applied Science, 1974.-
[30] Wiley , Mass Spectral Library , Registry 10th Edition / NIST 2011
[31] Wiley Registry of Mass Spectral Data, (Fred W. McLafferty), 10th Edition, (2013).

XI - Resumen de Objetivos

OBJETIVO GENERAL:
Lograr un adecuado nivel de conocimientos en los principios de las técnicas de IR, RMN, UV, y Masa, conocer sus alcances y limitaciones instrumentales.
OBJETIVO PARTICULAR: Alcanzar un correcto manejo de los fenómenos que se producen en los diversos instrumentos, reglas, modos operativos, esquemas de interpretación de espectros, modos alternativos de indagar en la determinación estructural, y finalmente la utilidad y aplicación de las técnicas en controles de alimentos, medicamentos, peritajes, pesticidas, productos industriales y o naturales, etc.

XII - Resumen del Programa

TEMA 1: ESPECTROSCOPÍA de ULTRAVIOLETA y VISIBLE, fundamentos y pricipios.
TEMA 2 : ESPECTROSCOPÍA DE INFRARROJO. Generalidades. El espectro rotacional-vibracional. Absorción y momento dipolar. Origen de las frecuencias de grupo.
TEMA 3: ESPECTROSCOPÍA DE INFRARROJO. Frecuencias de grupo. Efectos de ángulos de enlaces. Influencias de efectos inductivos y mesómeros. Aplicaciones. Estudio de uniones puente de hidrógeno.
TEMA 4: ESPECTROSCOPÍA DE INFRARROJO. Análisis espectral de IR. Aplicaciones estructurales. Dilucidación estructural. Bibliografia. Problemas de aplicación.
TEMA 5: ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE HIDROGENO-1. El fenómeno de RMN. Fenómenos de relajación. Representación de los espectros. Corrimiento químico. Mecanismos de protección y desprotección.
TEMA 6: ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE HIDROGENO-1. Interacciones espín-espín. Constantes de acoplamiento. Estudio particular de acoplamientos.
TEMA 7 : ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE HIDROGENO-1. Interacciones espínespín.
Espectros de primer orden y de orden superior. Valores de corrimientos y constantes de acoplamiento. Doble resonancia. Efecto NOE..
TEMA 8 : ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE HIDROGENO-1. Reactivos de desplazamiento paramagnético. Lantánidos. Determinación de configuración molecular desde los corrimientos inducidos por lantánidos.
TEMA 9 : ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE HIDROGENO-1. Aspectos dinámicos en RMN. Intercambio químico. Temperatura. Disolventes. Conformaciones. Estereoquímica, su determinación. Generalidades y ejemplos.
TEMA 10 : ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE HIDROGENO-1. Interpretación de espectros de RMN de compuestos orgánicos en general. Aplicaciones estructurales particulares.
TEMA 11 : ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE CARBONO -13. Generalidades. Comparación con el caso de RMN de H-1. Parámetros espectrales. Factores afectantes del corrimiento químico.

Correlaciones. Constantes de acoplamiento. Técnicas de asignación de señales en RMN de Carbono-13. Desacoplamientos heteronucleares parciales y totales. Ejemplos.
TEMA 12 : ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE CARBONO -13. Marcado isotópico. Reactivos de desplazamiento. Técnicas de inversión-recuperación y desacoplamiento selectivo de hidrógeno.
TEMA 13 : ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE CARBONO -13. Aplicaciones estructurales. Problemas combinados con otras técnicas espectrométricas . Espectrometría de RMN: Metodología de Pulsos y Transformadas. Efecto Nuclear de Ovehauser. Desacoplamiento pulsado por compuertas. Relajación en RMN. Técnicas mono y bidimensionales.
TEMA 14 : ESPECTROMETRÍA DE MASAS. Fundamentos. Tipos de espectrómetros. Iones gaseosos. Ionización., modalidades. Formas de representación de los EM.
TEMA 15 : ESPECTROMETRÍA DE MASAS. Iones Moleculares, fragmentos, reordenamientos. Reacciones ión-molécula y CID. Iones metaestables, propiedades. Espectros, interpretación y utilidad estructural. Marcado isotópico. Estudios genéticos.
TEMA 16 : ESPECTROMETRÍA DE MASAS. Fragmentaciones y reordenamientos. Reglas de descomposición. Efectos derivados de desplazamientos electrónicos. Expansión de anillos. Aspectos estereoquímicos en EM. Programas de fragmentación teórica y predicción estructural.
TEMA 17 : ESPECTROMETRÍA DE MASAS. Interpretación de EM. Detección de grupos funcionales. Uso combinado de información en EM, RMN, e IR en la dilucidación estructural.
TEMA 18 : ESPECTROMETRÍA DE MASAS. Sistemas combinados GC-EM. Detección de rutas de fragmentación experimentalmente y teóricamente.
TEMA 19 : SIMULACIÓN Y PREDICCIÓN DE ESPECTROS DE RMN, Simulación por aproximación. Software utilizado. Simulación basada en cálculos teóricos. Fundamentos.

XIII - Imprevistos

Serán resueltos, durante la cursada cuatrimestral.

XIV - Otros

ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA	
	Profesor Responsable
Firma:	
Aclaración:	
Fecha:	