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

**(Programa del año 2025)**
**(Programa en trámite de aprobación)**
**(Presentado el 11/06/2025 13:28:50)**

## I - Oferta Académica

| Materia | Carrera | Plan | Año | Período |
|---|---|---|---|---|
| DETERMINACIÓN DE ESTRUCTURAS ORGÁNICAS | LIC. EN QUIMÍCA | 12/21 | 2025 | 1° cuatrimestre |

## II - Equipo Docente

| Docente | Función | Cargo | Dedicación |
|---|---|---|---|
| RETA, GUILLERMO FEDERICO | Prof. Responsable | P.Adj Exc | 40 Hs |
| CIFUENTE, DIEGO ALBERTO | Prof. Colaborador | P.Asoc Exc | 40 Hs |
| PEÑALVA, FRANCISCO JAVIER | Responsable de Práctico | JTP Semi | 20 Hs |
| BERCA ESPINOSA, JULIAN | Auxiliar de Laboratorio | A.2da Simp | 10 Hs |

## III - Características del Curso

| Credito Horario Semanal | | | | |
|---|---|---|---|---|
| Teórico/Práctico | Teóricas | Prácticas de Aula | Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc. | Total |
| 6 Hs | Hs | Hs | 1 Hs | 7 Hs |

| Tipificación | Periodo |
|---|---|
| B - Teoria con prácticas de aula y laboratorio | 1º Cuatrimestre |

| Duración | | | |
|---|---|---|---|
| Desde | Hasta | Cantidad de Semanas | Cantidad de Horas |
| 12/03/2025 | 24/06/2025 | 15 | 105 |

## 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 más extensa la lista 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, o 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

**Programa analítico:**

TEMA 1: 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. Interacciones espín-espín. Principio de las mismas. Equivalencia química y magnética de los núcleos. Constantes de acoplamiento. Variación de las mismas en función de la geometría y sustituyentes. Efecto NOE. Generalidades y aplicaciones. Intercambio químico. Efectos de la Temperatura y Disolventes. Estudios conformacionales. Análisis cuantitativo por RMN. Ejemplos.

TEMA 2: 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 . Técnicas de asignación de las señales en RMN de Carbono-13. Desacoplamientos heteronucleares parciales y totales. Técnicas de desacoplamiento selectivo de hidrógeno. Aplicaciones estructurales.

TEMA 3: RMN BIDMENSIONAL:
Aplicaciones particulares sobre compuestos orgánicos sencillos y en el campo de esteroides, alcaloides , flavonoides, terpenoides. Manejo de tablas. Problemas combinados con otras técnicas espectrométricas. 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, HSQC, HMBC TOCSY y NOESY.

TEMA 4: ESPECTROSCOPÍA UV-VIS:
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 5: ESPECTROSCOPÍA DE INFRARROJO I.
Espectroscopia vibracional. Generalidades. Modos normales de vibración. Absorción y momento dipolar. Oscilador armónico. Sobretonos y bandas de combinación. El efecto de masa y fuerza de enlace. Grupos osciladores individuales y múltiples. Efectos de ángulos de enlaces. Influencias de efectos inductivos y mesómeros. Estudio de uniones puente de hidrógeno. Influencia de la temperatura, estado físico, concentración y disolventes en los espectros de IR.

TEMA 6: ESPECTROSCOPÍA DE INFRARROJO II. FT-IR:
Generalidades. Aplicaciones. Uso del IR con fines de dilucidación estructural. Frecuencias de grupo. Aplicaciones para distintos tipos de grupos funcionales orgánicos: alcanos, cicloalcanos, alquenos, alquinos, hidrocaburos aromáticos, alcoholes, fenoles, éteres, aldehídos, cetonas, ácidos carboxílicos, ésteres, haluros de alcanoílo, nitrilos, amidas, aminas y halogenuros de alquilo. Aplicaciones estructurales en compuestos orgánicos. Aspectos estereoquímicos. Problemas de aplicación.

TEMA 7: ESPECTROMETRÍA DE MASAS I.
Fundamento. Resolución. Tipos de espectrómetrosde masas. Instrumentalización. Sistemas de entrada de muestra: Directa e indirecta. Sistemas cromatográficos: CG, HPLC y electroforesis capilar. Fuentes de iones: EI, CI, FAB, ESY, MALDI, FI y FD. Sistemas de vacío. Analizadores de masa: analizador de sector magnético, cuadrupolo, trampa de iones y tiempo de vuelo. Detectores.

TEMA 8: ESPECTROMETRÍA DE MASAS II.
EI: Impacto electrónico. Fundamento. Ionización. Iones Moleculares. Reacciones ion-molécula y fragmentaciones inducidas por colisión. Iones metaestables. Propiedades de los mismos. Fragmentaciones y reordenamientos en EM de compuestos orgánicos. Reglas de Fragmentación. Reordenamientos. Transposiciones intramoleculares y de eliminación de fragmentos neutros. Migración de grupos funcionales. Expansión de anillos. Isotopos. Aspectos estereoquímicos en EM. Ejemplos. Interpretación de los EM de compuestos orgánicos. Programas de fragmentación teórica y predicción estructural.

TEMA 9: ESPECTROMETRÍA DE MASAS III.
CI: Ionización química. Fundamento. Sensibilidad. El proceso de ionización. Gases reactivos y rutas de Ionización. Fragmentación. Iones Negativos. Ejemplos y aplicaciones en química orgánica. FAB: Bombardeo con átomos rápidos. Proceso de ionización. Haces atómicos o de iones. Beneficios. Rango de masas. Cañón FAB. Ionización y Fragmentación. Propiedades de la matriz y del disolvente. Interpretación de espectros FAB-MS. Limitaciones. Ejemplos en química orgánica. Aplicaciones a macromoléculas. Problemas
TEMA 10: ESPECTROMETRÍA DE MASAS IV.
ESY: Electronebulización. Ionización a Presión Atmosférica. Fundamento. Ionización y Fragmentación. Modelo de cargas residuales. Ejemplos. Interpretación de espectros ESY. Deconvolución. MALDI: Desorción asistida por matriz. Fundamento. Ventajas y limitaciones. Ionización y Fragmentación. Características del láser y la matriz. Ejemplos. Interpretación de espectros MALDI-TOF. Aplicaciones a biomoléculas orgánicas. Problemas.

## VII - Plan de Trabajos Prácticos

Trabajos Prácticos:
Resolución de problemas de dilucidación estructural, empleando información de UV, IR, RMN-H-1, RMN-C-13, RMN Técnicas Bidimensionales, EM e información química. Con asistencia clase de empleo de los equipos y su funcionamiento. Se prevé una semana de trabajos prácticos de laboratorios intensivos utilizando las instalaciones del Instituto de Investigación en Tecnología Química, donde los alumnos podrán utilizar equipos de RMN y GC-MS

## VIII - Regimen de Aprobación

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 final, 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 rendir para aprobar un examen escrito, debiendo obtener una nota de siete.

## IX - Bibliografía Básica

**[1]** B. H. Stuart.; Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications.; John Wiley & Sons, Ltd; 2004
**[2]** J.H. Gross; Mass spectrometry: a textbook. 3rd Edition.; Springer; 2017
**[3]** Hoffman and V. Stroobant; Mass spectrometry. Principles and aplications. 3rd Edition.; John Wiley & Sons, Ltd; 2007
**[4]** Bretmaier E; Structure elucidation by NMR in Organic Chemistry; Wiley; 2002
**[5]** Claridge T. D. W; High-resolution NMR Techniques in Organic Chemistry; Pergamon; 2010

## X - Bibliografia Complementaria

**[1]** ADAMS, Robert P., Identification of Essential Oil Components by Gass Chromatography Mass. Spectroscopy, Allured
**[2]** Publishing Corporation Firth edition 1995, and Fourth edition 2007.
**[3]** Central Institute of Nutrition and Food Research, Mass Spectra of Volatiles in Food, SpecData, 2nd Edition, (2003)
**[4]** BREITMAIER E. Structure elucidation by NMR in Organic Chemistry. Wiley. 3rd Ed. 2002
**[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]** DIBBERN, H.W; MULLER,WIRBITZKI:, UV and IR Spectra of DUDDECK H., DIETRICH W., TOTH G. Structure Elucidation by Modern NMR. A Updated Edition. 1998 by Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
**[8]** DYER; Aplications of Absorption Spectroscopy of Organic Compounds; Prentice Hall.-
**[9]** GOTTLIEB; Introducción a la Espectrometría de Masas de Substancias Orgánicas; Monografía de OEA.-
**[10]** Chemistry and Structural Biology.2007 by John Wiley & Sons, Inc
**[11]** PASTO-JOHNSON; Organic Structure Determination; Prentice Hall.-

**[12]** Skoog, Douglas A., 2008 Principios de Análisis Instrumental.

## 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: ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE HIDROGENO-1.
TEMA 2: ESPECTROMETRÍA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE CARBONO -13.
TEMA 3: RMN BIDMENSIONAL:
TEMA 4: ESPECTROSCOPÍA UV-VIS:
TEMA 5: ESPECTROSCOPÍA DE INFRARROJO I.
TEMA 6: ESPECTROSCOPÍA DE INFRARROJO II. FT-IR:
TEMA 7: ESPECTROMETRÍA DE MASAS I.
TEMA 8: ESPECTROMETRÍA DE MASAS II.
TEMA 9: ESPECTROMETRÍA DE MASAS III.
TEMA 10: ESPECTROMETRÍA DE MASAS IV.

## XIII - Imprevistos

## XIV - Otros

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