

Plan 293 Lic. en Química

Asignatura 44237 DETERMINACION ESTRUCTURAL

Grupo 1

Presentación

Aplicación de los métodos espectroscópicos y no espectroscópicos a la elucidación estructural de compuestos orgánicos.

Programa Básico

- 1.- Resonancia Magnética nuclear de ^1H
- 2.- Resonancia magnética nuclear de ^{13}C
- 3.- Espectroscopía de Infrarrojo
- 4.- Espectroscopía de ultravioleta-visible
- 5.- espectrometría de masas
- 6.- Determinación estructural por aplicación conjunta de las espectroscopías de RMN, IR, UV-VIS y E-M

Objetivos

Descripción y evaluación de los métodos espectrométricos. Integración de estos métodos para la determinación estructural.

Programa de Teoría

1. Resonancia Magnética Nuclear de ^1H .

Introducción.- Desplazamiento químico; reglas de aditividad. Acoplamiento spin-spin. Integración. Aplicación de la RMN de ^1H a la Determinación Estructural de compuestos orgánicos.

2. Resonancia Magnética Nuclear de ^{13}C .

Introducción.- Desplazamiento químico; reglas de aditividad. Acoplamiento spin-spin. Técnicas de identificación de Carbono unido a Hidrógeno. Aplicación de la RMN de ^{13}C a la determinación Estructural de compuestos orgánicos.

3. Espectroscopía de infrarrojo.

Aspectos generales.- Vibraciones moleculares y frecuencias características.- Reglas de selección.- Frecuencias características de grupos y su distribución general en el espectro.- Interpretación de espectros de infrarrojo.

4. Espectroscopía de ultravioleta-visible.

Aspectos generales.- Tipos de transiciones electrónicas.- Grupos cromóforos y auxocromos.- Dienes y polienos.- Oxocompuestos a, b- insaturados.- Compuestos bencénicos.- Algunas aplicaciones de la espectroscopia ultravioleta-visible.

5. Espectrometría de Masas.

Instrumentación.- Métodos alternativos de ionización. El ión molecular e iones $M+1$ y $M+2$.- Mecanismos generales de fragmentación y reacciones de transposición.- Análisis de datos espectrales de masas.- Espectros de masas de los tipos más comunes de compuestos.

6. Determinación estructural por aplicación conjunta de las espectroscopias de IR, UV-VIS, RMN y la espectrometría de masas.

Principios generales.- Técnicas de trabajo.- Problemas espectroscópicos.

Programa Práctico

Evaluación

Examen escrito.

Bibliografía

SCHWARZ, J.C.P. "Métodos físicos en Química Orgánica". Ed. Acrilia, Zaragoza, 1968.

* SIMON, W.; CLERC, T.; SEIBL, J. y PRETSCH, E. "Tablas para la elucidación estructural de compuestos orgánicos por métodos espectroscópicos". Ed. Springer Verlag-Ibérica. Madrid, 1998.

* WILLIAMS, D.H. y FLEMING, I.A. "Métodos espectroscópicos en Química Orgánica. Problemas espectroscópicos en Química Orgánica". Ed. Urmo. Bilbao, 1971.

* SILVERSTEIN, BASSLER y MORRILL. "Spectrometric identification of Organic Compounds". Ed. Wiley, N. Y. 1991.
