UNIVERSIDAD DE CHILE

Fac. Ciencias Químicas y Farmacéuticas

Depto. Química Orgánica y Fisicoquímica

**Curso : Química Analítica Orgánica**

periodo : 2ª Semestre 2011

requisito : Química Orgánica III y Física II

horas teoricas semestrales : 45

horas de seminario : 60

carrera : Química

nivel : vi Semestre

semanas lectivas : 13

profesor coordinador : Dra. Carolina jullian m.

profesores participantes : Dr. Hernán Pessoa M.

Dr. Claudio Saitz B.

Dr. Ramiro Araya M.

# I. objetivos del curso

Entregar al alumno una sólida base teórica acerca de los fundamentos y aplicaciones de las técnicas espectroscópicas normalmente empleadas en la determinación de estructuras. En tal sentido, el alumno conocerá las bases espectroscópicas de las Espectroscopia Infrarroja, Resonancia Magnética Nuclear (mono y bidimensionales) de protones y carbono y Espectrometría de Masas. Este curso está orientado a que el alumno sea capaz, a través de una correcta interpretación espectral avalada por una sólida sesión de ejercicios, plantear fundamentalmente a través de la asignación de bandas, la estructura correcta para un compuesto orgánico de fórmula desconocida.

**II.** **Calendario y contenido del curso**

SEMANA 1 (21 – 25 Noviembre) ESPECTROSCOPIA IR (HPM)

SEMANA 2 (28 –2 Diciembre) ESPECTROSCOPIA IR (HPM)

SEMANA 3 (5 – 9 Diciembre) ESPECTROSCOPIA 1H-RMN (RAM)

SEMANA 4 (12 – 16 Diciembre) ESPECTROSCOPIA 1H-RMN (RAM)

SEMANA 5 (19 – 23 Diciembre) ESPECTROSCOPIA 1H-RMN (RAM)

SEMANA 6 (26 – 30 Diciembre) ESPECTROSCOPIA 1H-RMN (RAM)

SEMANA 7 (2 – 6 Enero) ESPECTROSCOPIA 13c-RMN (CSB)

SEMANA 8 (9 – 13 Enero) ESPECTROSCOPIA 13c-RMN (CSB)

SEMANA 9 (16 – 20 Enero) ESPECTROSCOPIA 2D-RMN (CSB)

SEMANA 10 (23 – 27 Enero) ESPECTROSCOPIA 2D-RMN (CSB)

SEMANA 11 (30 – 3 Febrero) ESPECTROSCOPIA 2D-RMN (CSB)

SEMANA 12 (5 – 9 Marzo) ESPECTROMETRIA DE MASA (CJM)

SEMANA 13 (12 – 16 Marzo) ESPECTROMETRIA DE MASA (CJM)

**ESPECTROSCOPIA IR**

Aplicaciones y características espectrales de la región infrarroja. Características generales del equipo y la carta espectral. Tipos de vibraciones involucrados y análisis de zonas de frecuencias fundamentales análisis de las bandas observadas y su relación con las frecuencias vibracionales esperadas para cada función orgánica

Ejercicios y aplicaciones en la determinación estructural.

**ESPECTROSCOPIA DE 1h y 13C RMN**

Teoría y fundamentos de la Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear. Breve descripción del instrumento. Concepto de desplazamiento químico y campo magnético, equivalencia química, equivalencia magnética. Acoplamiento vecinales simples spin-spin. Sistemas de acoplamiento AMX, ABX y ABC. Efecto de un centro quiral. Acoplamientos de largo alcance. Acoplamiento vecinal en sistemas rígidos.

Fundamento de la espectrosocpía 13C. Desplazamiento químico en relación a las funciones orgánicas. Cálculo teórico de desplazamiento químico en compuestos alifáticos y aromáticos. Estudio de obtención en interpretación de espectros DEPT. aplicación de la técnica en la caracterización de un compuesto.

# ESPECTROSCOPIA 2D-RMN

Teoría y fundamentos. Conectividades 1H-1H. Interpretación de espectros COSY. Conectividades 1H-13C directas y a largo alcance (2*J*, 3*J* y 4*J*) HMQC y HMBC. Ejercicios e interpretación conjunta de espectros. Asignación inequívoca de isómeros.

# ESPECTROMETRIA DE MASA

Introducción, aspectos de la técnica y aspectos instrumentales. Espectros de deflección magnética. Reconocimiento del ion molecular. Patrones de fragmentación y reordenamiento de las principales funciones químicas. Ejercicios de la técnica y ejercicios complementarios.

**EVALUACIÓN:**  dos pruebas A (30% c/u), exámen (40%).

Habrá eximición (Promedio 5.0)

A1 + A2 = Promedio 5,0 eximido (APROBADO)

A1 + A2 = Promedio < 5,0 a examen

A1 o A2 + PRE (> o igual a 4,0) = Promedio 4,0 o > (APROBADO).

A1 o A2 + PRE (< a 4,0) = Promedio 4,0 a examen

A1 + A2 Sobre 4,0 pero < 5,0 sin pre = (a examen).

HORARIO: sala

Martes 10:20 – 13:00 09

Jueves 9:20 – 11:10 13