

"LAS MALVINAS SON ARGENTINAS"

SALTA, 29 de abril de 2.022

EXP-EXA: Nº 8.443/2011

RESCD-EXA Nº 206/2022

### VISTO:

La presentación efectuada por la Dra. María Laura URIBURU, solicitando la aprobación del Programa de la asignatura "Química Orgánica III", como así también del Régimen de Regularidad y Promoción para las carreras: Licenciatura en Química (plan 2.011); y

### **CONSIDERANDO:**

Que, el citado Programa y el Régimen de Regularidad y Promoción, todos ellos obrantes en las presentes actuaciones, fueron sometidos a la opinión del Departamento de Química y de la citada Comisión de Carrera.

Que, la Comisión de Docencia e Investigación en su despacho del 05/04/2022, aconseja aprobar el programa analítico y el régimen de regularidad y promoción de la asignatura "Química Orgánica III".

Que, el Consejo Directivo en su sesión ordinaria realizada en modalidad mixta (presencial y virtual) el día 13/04/2022, aprueba por unanimidad el despacho de Comisión de Docencia e Investigación.

POR ELLO, y en uso de las atribuciones que le son propias;

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS (En su sesión ordinaria del día 13/04/2022)

# RESUELVE:

ARTÍCULO 1°: Aprobar el Programa Analítico de la asignatura "Química Orgánica III" como así también al respectivo Régimen de Evaluación y Promoción, para las carreras: Licenciatura en Química (plan 2.011), que como Anexo I forma parte de la presente resolución.

ARTÍCULO 2º: Notifíquese fehacientemente a la Docente Responsable de Cátedra: Dra. María Laura URIBURU. Hágase saber, con copia, a la Comisión de Carrera de: Licenciatura en Química, al Departamento de Química, a la Secretaría Académica e Investigación de la Facultad, a la División Archivo y Digesto y al Departamento de Alumnos para su toma de razón, registro y demás efectos. Publíquese en la página web; cumplido, archívese.

MRM sbb

> DIA MARÍA RITA MARTEARENA SECIETARIA ACADÉMICA Y DE INVESTIGACIÓN FACULTAD DE CS. EXACTAS - UM98.

G. Addona

Ing. DANIEL HOYOS

DECANO
FAGULTAD DE CS. EXACTAS - UNSA

## PROGRAMA DE QUÍMICA ORGÁNICA III

Asignatura: Química Orgánica III

Carrera: Licenciatura en Química (plan 2011)

Fecha de presentación: 6/12/2021

Departamento: de Química – Facultad de Ciencias Exactas

Profesor responsable: María Laura Uriburu Monasterio

Modalidad de dictado: Cuatrimestral

Carga Horaria semanal: 3hs clases teóricas y 6hs clases prácticas

## Objetivos de la asignatura

Formar a través del desempeño en el trabajo científico, un profesional con capacidad de progreso independiente que contribuya a necesidades e intereses del medio a través de servicio científico-técnico, tanto en el desempeño en laboratorios químicos como en asesorías, con aportes de excelencia académica. Promover la búsqueda de información actualizada en bases de datos científicas.

Estimular el aprendizaje autónomo y la transmisión de lo aprendido.

Consolidar el manejo de actividades relacionadas al desempeño en el laboratorio.

Afianzar los procesos de análisis de datos obtenidos de una experiencia científica y plantear las conclusiones derivadas de los mismos a través de la elaboración de un informe escrito.

Capacitar en el uso de técnicas de laboratorio concernientes a separación y purificación de productos, orientados al análisis de compuestos orgánicos.

Dilucidar estructuras de compuestos orgánicos mediante pruebas químicas y análisis de espectros obtenidos a partir de diferentes métodos espectroscópicos.

### Desarrollo del programa analítico

# A.- BIBLIOGRAFIA

### TEMA 1

Introducción a la búsqueda bibliográfica. Fuentes de información primaria y Secundaria. Revistas de resúmenes. Revistas sobre publicaciones periódicas. Recopilaciones sobre datos físicos y químicos. Recopilaciones espectrales. Libros de texto. Biblioteca Electrónica.

#### B.- QUIMICA ANALITICA ORGANICA

#### TEMA 2

Separación y purificación de muestras gaseosas, liquidas y sólidas. Extracción liquido-sólido y liquido-liquido. Cromatografía de adsorción y partición, en columna, en capa fina, sobre papel (mono y bidimensional), de gases, por tamaño molecular, de intercambio iónico. Separación de mezclas.

## C.-ESPECTROSCOPIA VISIBLE Y ULTRAVIOLETA

#### TEMA 3

La absorción de la luz en la zona espectral del Visible y del Ultravioleta. Excitación electrónica. Transiciones, energía involucrada. Efecto de la estructura molecular sobre el espectro electrónico. Grupos cromóforos y auxocrómicos. Absortividad. Efectos batocrómico, hipsocrómico, hipo- e hipercrómico.

pusul

#### TEMA 4

Espectros de absorción de compuestos libres de efectos de deslocalización electrónica. Grupos cromóforos simples. Grupos cromóforos conjugados. Predicción de espectros ultravioleta. Reglas empiricas aplicadas a olefinas, cetonas saturadas y otros derivados carbonílicos.

#### TEMA 5

Moléculas con sistemas conjugados. Carotenos. Sistemas aromáticos, benceno y derivados. Hidrocarburos aromáticos no bencénicos. Compuestos aromáticos heterocíclicos. Influencia de los sustituyentes sobre la absortividad. Efectos estéricos. Hidrocarburos aromáticos lineales. Hidrocarburos aromáticos conjugados.

### D.- ESPECTROSCOPIA INFRARROJA

#### TEMA 6

Infrarrojo cercano. Infrarrojo medio. Infrarrojo lejano. Vibración molecular, distintos tipos. Energías involucradas. Equipamiento. Sistemas de medición. Preparación de la muestra de gases, líquidos y sólidos. Disolventes.

#### TEMA 7

Aplicaciones de la espectroscopia infrarroja. Absorciones de grupos funcionales comunes. Determinación de pureza. Tablas de referencia de bandas de absorción características. Hidrocarburos alifáticos. Distintos tipos de vibraciones en hidrocarburos saturados e insaturados. Uniones carbono-carbono y carbono-hidrogeno. Hidrocarburos aromáticos. Éteres alifáticos y aromáticos. Alcoholes. Variación de la absorción por influencia del entorno químico.

### TEMA 8

Absorciones en moléculas que contienen grupo carbonilo. Cetonas. Aldehídos. Ácidos y derivados de ácido. Uniones nitrógeno-hidrógeno, nitrógeno-carbono, nitrógeno-nitrógeno. Aminas alifáticas y aromáticas. Vibraciones de triple enlace. Efecto de isotopos.

### E.- RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR

### TEMA 9

Propiedades magnéticas de los núcleos. Concepto de espín nuclear y momento magnético. Absorción de energía de los núcleos. Desplazamiento químico. Acoplamiento directo e indirecto (escalar). Mecanismo de las interacciones. Constante de acoplamiento escalar. Relación entre la constante de acoplamiento escalar, la estructura y la estereoquímica de un compuesto. Multiplicidad de las señales.

## **TEMA 10**

Interpretación de los espectros. Protones alifáticos, olefinicos y acetilénicos. Protones unidos a nitrógeno y oxígeno. Protones aldehídicos. Protones □-carbonílicos. Protones aromáticos y vinílicos. Aplicaciones: determinaciones estructurales. Análisis de mezclas.

#### **TEMA 11**

Técnicas de pulso. Inducción de la magnetización nuclear y decaimiento libre. Relajación del spin nuclear (T1, T2 y T2\*). Correspondencia entre los dominios del tiempo y la frecuencia. Doble resonancia. Efecto nuclear de Overhauser. Desacoplamiento homo y heteronuclear: aplicaciones. Conceptos básicos de técnicas de Correlación en dos dimensiones: COSY, HETCOR, HSQC, COLOC y HMBC, interpretación de espectros.

Jusul

### **TEMA 12**

Desplazamiento químico de 13C. Alcanos, alquenos y alquinos. Compuestos aromáticos. Alcoholes. Éteres. Aminas. Grupo carbonilo.

### F.- ESPECTROMETRIA DE MASA

## **TEMA 13**

Fundamento del método. Equipo: introducción de muestra, fuentes de ionización, analizadores de masas, sistemas de detección. Producción y reacción de iones gaseosos. Potencial de ionización y potencial de aparición. Determinación de peso molecular y formula molecular. Picos metaestables. Espectro de iones negativos. Espectrometría de masa de alta resolución. Estabilidad relativa del ion molecular. Estabilidad relativa de enlaces. Espectrometría de masa tándem.

#### **TEMA 14**

Formas de fragmentación y reordenamientos: Hidrocarburos alifáticos, aromáticas, alcoholes saturados e insaturados, éteres, aldehídos, cetonas, ácidos y derivados de ácido, aminas, amidas. Interpretación de espectros. Asociación de instrumentos: cromatografía gaseosa espectrometría de masa.

## Desarrollo del programa de Trabajos Prácticos y/o Laboratorios

# **Trabajos Prácticos**

- 1. Bibliografía Química. Bases de Datos. Búsqueda bibliográfica en bases de datos. Biblioteca electrónica institucional.
- 2. Pruebas químicas en la determinación de grupos funcionales. Revisión de conceptos relacionados con métodos de purificación: cristalización, destilación y sublimación.
- 3. Repaso del estado fundamental e híbridos de los átomos de carbono, nitrógeno y oxígeno. Efecto inductivo y mesomerico. Aromaticidad. Intermediarios Químicos.
- 4. Revisión de conceptos afines a la radiación electromagnética, relación con longitud de onda, frecuencia y energía. Ley de Lambert y Beer. Espectros rotacionales y vibracionales.
- 5. Repaso del cálculo de orbitales moleculares por Huckel.
- 6. Discusión individual y combinada de espectros UV-Visible, IR, <sup>1</sup>H RMN, <sup>13</sup>C RMN y EM.

## Guías de Laboratorio

Trabajo Practico No 1: Análisis de Grupos Funcionales. Duración: 3 clases.

Trabajo Practico No 2: Aplicación de técnicas cromatografías. Duración: 2 clases.

Trabajo Practico No 3: Espectroscopia UV-Visible. Duración: una clase.

Trabajo Practico No 4: Espectroscopia infrarroja. Duración: una clase.

Trabajo Practico No 5: Separación por cromatografía flash y espectros de absorción de carotenos. Duración: dos clases.

Trabajo Practico No 6\*: Obtención de teobromina a partir de cacao. Duración: una clase.

Trabajo Practico No 7\*: Obtención de cafeína a partir de té comercial. Duración: una clase.

Trabajo Practico No 8: Trabajo Practico Especial. Aislamiento, purificación y determinación estructural de compuestos químicos obtenidos de plantas. Duración: 5 clases.

\*El alumno realizara uno de los dos trabajos practicos propuestos.

Jusus A

#### A.- BIBLIOGRAFIA

Biblioteca Electrónica https://biblioteca.mincyt.gob.ar/ Science Directhttps://www.sciencedirect.com/ Scielohttps://scielo.org/es/

X. A. Domínguez. Bibliografía Química. 1970. Ed. Limusa-Wiley, S.A. México.

Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales. Vocabulario Científico y Técnico. 1996. Ed. Espasa, 3a edición. Madrid. (Vocabulario científico y técnico; Sistema internacional de unidades, Diccionario Español-Inglés, Inglés-Español).

# **B.- QUIMICA ANALITICA ORGANICA**

- J. I. García, J.A. Dobado Jiménez, F. García Calvo-Flores, H. Martínez García. 2013. Ed. Ibergarceta Publicaciones S.L., Madrid.
- J. Mohan. Organic Analytical Chemistry. Theory and Practice. 2003. Alpha Science International Ltd. Pangbourne, England.
- D. A. Skoog, F. J. Holler, T. A. Nieman. Principios de Análisis Instrumental. 2001. Ed.
- McGraw-Hill/Interamericana de España S.A.U., España.
- M. Lederer. Chromatography for Inorganic Chemistry. 1994. Wiley & Sons, England.
- C. F. Poole and S. Poole. Chromatography Today. 1991. Ed. Elsevier, Amsterdan.
- D. C Gary. Química Analítica. 1990. Ed. Limusa, México.
- H. Small. Ion Chromatography. 1989. Ed. Plenum Press. USA.
- X. A Domínguez. Métodos de investigación en fitoquímica. 1985. Ed. Limusa, México.
- K. A Connors. Curso de análisis farmacéutico. Ensayo del medicamento. 1980. Ed. Reverte, España.
- Smith and J. G. Feinberg. Cromatografía sobre papel y capa fina. Electroforesis. 1979. Ed. Alhambra, 2a edición. España.
- D. J. Pasto y C. R. Jonson. Determinación de estructuras orgánicas. 1974. Reverte S.A.
- R. L. Schriner, R.C. Fuson, D.Y. Curtin. Identificación sistemática de compuestos orgánicos. 1972.
   Ed. Limusa-Wiley, S.A., México.
- T. C. Owen. Caracterización de compuestos orgánicos por métodos químicos. Tratado de
- Introducción al laboratorio. 1971. Ed. Reverte S.A., Barcelona.

# C-F.- ESPECTROSCOPIA Y ESPECTROMETRIA

- R. Silverstein, F. X. Webster, D.J. Kiemle, D.L. Bryce. Spectrometric Identification of Organic compounds. 2015. John Wiley & Sons, 8a edition. USA. Disponible impreso y online.
- D. L. Pavia, M. G. Lampman, G. S. Kriz. J. R. Vyvyan. Introduction to Spectroscopy. 2015. Cengage Learning.5a edición. USA. Disponible impreso y online.
- L.D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman. Organic Structures from Spectra. 2013. John Wiley & Sons. 5a edición. UK. Ejemplar de catedra y también disponible online.
- H. Gunther. Basic Principles, Concepts and Applications in Chemistry. 1998. John Wiley & Sons. 3a edición. UK.
- M. Thomas. Ultraviolet and Visible Spectroscopy. 1996. John Wiley & Sons, 2a edición. UK.
  - M. Hesse, Herbert Meier, Bernd Zeeh. Métodos espectroscópicos en Química Orgánica. 1995.
  - Ed. Síntesis. 2a edición. España.
- K. Nakanishi. One-dimensional and Two-dimensional NMR Spectra by Modern Pulse
- Techniques. 1990. University Science Books, California.
- J. W. Cooper Spectroscopic techniques for organic chemists. 1980. John Wiley & Sons, INC. USA.

Jusus

- G. C. Levy, R. L. Lichter, G. L. Nelson. Carbon-13. Nuclear Magnetic Resonance
- Spectroscopy. 1980. John Wiley & Sons, USA.
- R.T. Conley Espectroscopia infrarroja. 1979. 2a Ed. Ed. Alhambra S.A. España.
- R. M. Roberts, J. C. Gilbert. An introduction to modern experimental organic chemistry. 1974. Ed. Holt, Rinehart and Winston, INC, USA.

# Específicos de Espectrometría de masa

- J. H. Gross. Mass Spectrometry. A Textbook. 2011. Springer-Verlag. 2a edición. Berlin. (Ejemplar de cátedra y disponible online).
- E. de Hoffmann and Vincent Stroobant. 2007. Mass Spectrometry. Principles and Applications.
   John Wiley & Sons. 3a edición. UK.
- L. Esteban. La Espectrometría de Masas en Imágenes. 1993. ACK Editores. (Libro de Catedra).
- J. Seibl. Espectrometría de masas. 1973. Ed. Alambra. España.
- F. W. McLafferty. Interpretacion de los espectros de masas. 1969. Ed. Reverte. Madrid.

### Metodología y descripción de las actividades teóricas y prácticas

Clases Teóricas: Las clases teóricas se imparten utilizando principalmente pizarrón. Algunos de los temas expuestos se afianzan mediante la proyección de filminas en retroproyector. Las mismas están a cargo del Profesor responsable, el Auxiliar Docente participa en el dictado parcial de algunos temas que varían en años consecutivos.

*Trabajos Prácticos:* Los alumnos disponen de guías de problemas elaboradas por la catedra de los temas abordados en las clases teóricas. Los ejercicios son resueltos con anterioridad a la clase práctica, expuestos individualmente y discutidos en grupo durante el desarrollo de la misma. Los temas a desarrollar son coordinados por el Profesor responsable y el Auxiliar Docente.

Este sistema permite al alumno adquirir un conocimiento profundo y actualizado en el área indagada, discutirlo y transmitirlo a sus compañeros. Es importante también el aporte de los docentes posibilitando la actualización, ampliación y corrección de conceptos.

La preparación de los temas a exponer con anticipación a la clase práctica responsabiliza a los alumnos y fortalece el compromiso hacia sus compañeros, al realizar el trabajo que los mismos deben conocer a través del tema en estudio expuesto. Por otra parte, se consolida el trabajo en equipo y se desarrollan habilidades en las relaciones interpersonales.

**Prácticas de Laboratorio**: Considerando que Química Orgánica III es una asignatura del ciclo profesional, las experiencias Prácticas responden a objetivos que le permitan al futuro egresado un desenvolvimiento seguro en el laboratorio y la aplicación de técnicas adecuadas en sus experiencias.

Las clases de laboratorio consisten en el análisis sistemático de muestras orgánicas con el fin de afianzar la ejecución e interpretación de reacciones químicas en la caracterización de grupos funcionales de compuestos orgánicos. Para esto, el alumno recibe dos muestras orgánicas, a las que se les realiza un estudio mediante pruebas físicas, ensayos de solubilidad, se analizan los resultados para obtener información estructural, posteriormente realizan pruebas de caracterización de grupos funcionales comparando resultados contra testigos apropiados.

Luego se continúa con la realización de trabajos prácticos referidos a los temas de separación y purificación. Las guías pueden variar de ano a ano y también está la posibilidad de que el alumno proponga la realización de una experiencia que este referida a los temas de estudio en la materia. Durante las clases, el alumno debe preparar el material necesario. En esta etapa se realizan espectros Infrarrojo y UV-Visible

Mul



de las muestras incógnita, cuando es factible se envían las muestras a otros centros para obtener espectros de Resonancia Magnética Nuclear de <sup>1</sup>H y <sup>13</sup>C.

Durante las clases de laboratorio se toman las medidas de seguridad pertinentes al tema desarrollado, en las guías se mencionan las principales acciones a tener en cuenta relacionadas con la peligrosidad y manipulación de las drogas utilizadas. Los alumnos trabajan en un ambiente de laboratorio ventilado que consta de campana de extracción y cercano a una vía de evacuación. La catedra proporciona gafas de seguridad, guantes de látex siendo obligatorio el uso de delantal.

# Sistemas de evaluación y promoción

Para la regularización de la materia se deben aprobar tres parciales con nota superior a 60/100 puntos. La asistencia a Clases Teóricas no es obligatoria, siendo necesario el cumplimiento de asistencia al 80 % de Clases de Seminario y la aprobación del 100% de Trabajos Prácticos de Laboratorio.

Para la aprobación de la materia se debe rendir un examen final oral, donde se evalúan habilidades en el laboratorio al determinar los grupos funcionales por reacciones de reconocimiento de una muestra problema proporcionada por la Catedra. Tres horas previas al examen oral se entrega al alumno el juego de espectros de UV, IR y RMN correspondiente a la muestra problema. En la exposición oral el alumno debe proponer y justificar la asignación estructural de la muestra con argumentos químicos y espectroscópicos.

Los alumnos en condición de "alumno libre" deberán aprobar un examen integrador donde se aborden los temas correspondientes al programa con nota superior a 60/100, luego se rendirá un examen con las mismas características de un examen en condición de alumno regular.

DTA MARÍA RITA MARTEARENA SECRETARIA ACADÉMICA Y DE INVESTIGACIÓN FACULTAD DE CS. EXACTAS - UN99. Ing. DANIEL HOTES

DECANO

FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSA