



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

(Programa del año 2008)  
(Programa en trámite de aprobación)  
(Presentado el 02/07/2008 10:54:21)

### I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
EVALUACION Y CARACTERIZACION DE METABOLITOS SECUNDARIO	T.U.P.E.P.A.	47/03	3	2c

### II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
ROSSOMANDO, PEDRO CLEMENTE	Prof. Responsable	P.TIT EXC	40 Hs
ARDANAZ, CARLOS ENRIQUE	Prof. Colaborador	P.ASO EXC	40 Hs
GARCIA, EDUARDO EDMUNDO	Prof. Colaborador	JTP 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	1 Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
10/03/2008	20/06/2008	14	120

### IV - Fundamentación

La evaluación y caracterización de metabolitos secundarios de origen vegetal se han convertido en procesos analíticos de fundamental importancia. Es imperativo conocer la estructura y aplicaciones de los mismos, dada su gran demanda actual.

### V - Objetivos

Son objetivos de la Asignatura:

Alcanzar un adecuado conocimiento de la relación estructura molecular: propiedades físico-químicas de los compuestos orgánicos. Con un enfoque particular sobre los metabolitos secundarios, de origen vegetal.

Introducción a los métodos espectroscópicos de análisis en química orgánica, vitales en la determinación estructural y evaluación de metabolitos secundarios.

El modo de enseñanza/aprendizaje es teórico práctico.

### VI - Contenidos

#### Cromatografía gaseosa.

Espectrometría de masas. Ejercitación.

Propiedades físicas

Resonancia Magnética Nuclear. Ejercitación.

**1- Cromatografía gaseosa, tipos y modelos de cromatógrafo, inyector, horno, programación; Detectores: FDI, espectrómetro de masas, registradores,. Tipos de columnas cromatográficas: empacadas, capilares, características generales. Gas carrier, nitrógeno, helio, hidrógeno, características y usos. Reguladores de presión, de una y dos etapas.**

**2- Cromatograma típico, área de pico, línea base, ventajas y limitaciones de la cromatografía gaseosa, análisis cualitativo y cuantitativo. Análisis rápidos, típicos. Compromiso y optimización de parámetros. C.G. de alta velocidad, ventajas y desventajas. Columnas de diámetro interno pequeño. Ecuación de Golay, parámetros, tiempo de retención, Platos teóricos, capacidad, selectividad, eficiencia, resolución, interpretación de la ecuación de Golay.**

**3- Inyectores, on-column, slitt, split-less, descripción, acoplamiento del espectrómetro de masas con el cromatógrafo de gases de columna capilar, ó empacada; Como evitar problemas, diagnóstico desde el cromatograma.**

**4- Fundamentos y Técnicas de la espectrometría de masas. Tipos de instrumentos. Ionización por impacto electrónico. Ionización Química. Separación de masas, resolución; Espectrometría de masas de baja y alta resolución; Contribuciones Isotópicas. Homólisis, heterólisis, hemi-heterólisis; El Ión Molecular [M]<sup>+</sup>, propiedades. Reacciones de descomposición inducidas por impacto electrónico, Reglas de Fragmentación. Transposiciones. Esquema de Interpretación.**

Ejercitación.

**5.- Punto de fusión: Punto de fusión concepto, definición. Micro método del tubo capilar. Determinación del punto de fusión de sustancias conocidas a fin de evaluar la exactitud del método utilizado. Determinación del punto de fusión de sustancias impurificadas, concepto de “Punto eutéctico”**

**6.- Índice de refracción: Conceptos básicos del fenómeno de refracción de la luz . Descripción del refractómetro de Abbe. Determinación del índice de refracción de líquidos puros.**

**7.- Cromatografía: Concepto, tipos de cromatografías, separación cromatografía de dos sustancias (colorantes anaranjado de metilo y verde cristal).**

**8.- Normas IRAM: Descripción de algunas normas IRAM utilizadas en la evaluación de calidad de aceites esenciales.**

**9.- Resonancia Magnética Nuclear. Introducción. Fundamentos. Espectros de RMN. Desplazamiento químico e integración. Acoplamientos. Multiplicidad de señales.**

**10.- Resonancia de grupos funcionales. Uso de deuterio. Interpretación de espectros. Resolución de problemas estructurales.**

## **VII - Plan de Trabajos Prácticos**

El plan de Trabajos Prácticos incluye la ejercitación en todos los tópicos desarrollados.

## **VIII - Regimen de Aprobación**

Promoción sin examen.

### IX - Bibliografía Básica

- [1] EGE S. Química Orgánica. Estructura y reactividad. Ed. Reverté S.A.
- [2] LOUDON M.G.; Organic Chemistry, Addison-Wesley Publishing Co. 2nd Ed. 1988.
- [3] BREITMAYER E. Structure elucidation by NMR in organic chemistry. A practical guide. John Wiley and sons. 2002.
- [4] Monografía de Cromatografía de Gases editado por la Organización de Estados Americanos, 1980-1990.
- [5] SEIBL J.; Espectrometría de Masas; Ed. Alhambra, 1973.
- [6] GOTTLIEB; Introducción a la Espectrometría de Masas de Substancias Orgánicas; Monografía de OEA.

### X - Bibliografía Complementaria

- [1] Mc LAFFERTY; Interpretación de los Espectros de Masas; Ed. Reverté, 1969.
- [2] PASTO-JOHNSON; Organic Structure Determination; Prentice Hall.-SHRINER; The Systematic Identification of Organic Compounds; Wiley, 1970.SILVERSTEIN-BASSLER; Spectrometric Identification of Organic Compounds; J.Wiley, 1994.
- [3] WILLIAMS-FLEMING; Métodos Espectroscópicos en Química Orgánica; Urmo, 1968.
- [4] WILLARD H H, MERRIT L L, DEAN J H; Metodos Instrumentales de Analisis; Compañía Editorial Continental S.A. 4ta.Ed.

### XI - Resumen de Objetivos

Son objetivos de la Asignatura:

Alcanzar un adecuado conocimiento de la relación estructura molecular: propiedades físico-químicas de los compuestos orgánicos. Con un enfoque particular sobre los metabolitos secundarios, de origen vegetal.

Introducción a los métodos espectroscópicos de análisis en química orgánica, vitales en la determinación estructural y evaluación de metabolitos secundarios.

El modo de enseñanza/aprendizaje es teórico práctico.

### XII - Resumen del Programa

- 1- Cromatografía gaseosa
- 2- Cromatograma típico
- 3- Inyectores
- 4- Fundamentos y Técnicas de la espectrometría de masas
- 5.- Punto de fusión
- 6.- Índice de refracción
- 7.- Cromatografía
- 8.- Normas IRAM
- 9.- Resonancia Magnética Nuclear
- 10.- Resonancia de grupos funcionales

### XIII - Imprevistos

<b>ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA</b>	
	<b>Profesor Responsable</b>
Firma:	
Aclaración:	
Fecha:	