



UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE PEREIRA
FACULTAD DE TECNOLOGÍA
ESCUELA DE QUÍMICA
QUÍMICA INDUSTRIAL

ASIGNATURA:

CÓDIGO:

CRÉDITOS ACADÉMICOS:

INTENSIDAD SEMANAL:

ANÁLISIS ORGÁNICO

QI714

4

T=3

P=4

TOTAL: 7 HORAS

OBJETIVO:

Al finalizar el curso, el alumno estará en capacidad de:

1. Determinar las constantes físicas, los elementos presentes y la solubilidad de compuestos orgánicos puros y utilizar esta información en la caracterización de muestras problemas
2. Aplicar las diversas pruebas o ensayos químicos para determinar los grupos funcionales presentes en una muestra dada.
3. Conocer y aplicar las reacciones más comunes para la preparación de derivados apropiados y las características que éstos deben tener para que aporten información concreta en la identificación de una muestra problema.
4. Interpretar y correlacionar la información presente en los espectros de: UV, IR, RMN y EM las aplique en la determinación de la estructura de una muestra determinada.
5. Aislar, purificar e identificar sistemáticamente los compuestos orgánicos que conforman una mezcla problema.

CONTENIDO:

1. Esquema del análisis de un compuesto orgánico :

Estado y propiedades físicas. Pruebas químicas. Técnicas espectroscópicas. Preparación de derivados. Métodos de purificación. Manejo de bibliografía. Precauciones y normas de seguridad.

2. Determinación de las constantes físicas :

Puntos de fusión y ebullición. Índice de refracción. Densidad. Rotación óptica. Peso molecular.

3. Análisis Cualitativo Elemental :

La fusión sódica. Pruebas específicas para la determinación de: azufre, nitrógeno y halógenos.

4. Clasificación por su solubilidad :

Polaridad y solubilidad. La estructura y su influencia en la solubilidad de los compuestos orgánicos. Solubilidad en agua, éter etílico, hidróxido de sodio al 5%, Ácido Clorhídrico al 5%, Bicarbonato de sodio diluido, Ácido Sulfúrico concentrado y Acido Fosfórico concentrado. Clasificación de las sustancias problemas de acuerdo a su solubilidad. Ejercicios.

5. Pruebas químicas para la determinación del grupo grupos funcionales presentes en una muestra desconocida :

a. Pruebas generales: ensayos de aromaticidad, instauración. Pruebas para sales. Pruebas para instauración activa. La prueba del yodoformo. Prueba de Beilstein. Utilización de la espectrofotometría UV para detectar instauraciones y aromaticidad en compuestos orgánicos.

b. Pruebas específicas para: alcoholes, aldehídos, cetonas, ácidos, derivados de ácido, aminas, etc. Ejercicios.

6. Preparación de derivados :

Generalidades. Selección de los derivados. Derivados recomendados. Precauciones en la preparación de los derivados.

Preparación de derivados de acuerdo con sus respectivos grupos funcionales. Ejercicios.

7. Separación de mezclas:

- Pruebas de solubilidad en agua, ácidos, bases y solventes orgánicos y su relación con los procesos de separación.
- Técnicas de separación de mezcla con base en su comportamiento de solubilidad y aspectos estructurales.
- Introducción a la separación de mezclas a través de los métodos cromatográficos de cromatografía de capa delgada (CCD) y cromatografía de columna (CC).

8. Métodos espectroscópicos para la determinación de Grupos Funcionales en compuestos orgánicos :

Introducción sobre el uso de las técnicas espectroscópicas de: Ultravioleta, Infrarrojo, de Resonancia Magnética Nuclear (protónica, de carbono trece en una y dos dimensiones) y espectrometría de masas en la identificación de compuestos orgánicos desconocidos. Ejercicios.

Espectroscopia de ultravioleta

Métodos espectroscópicos para la determinación de Grupos Funcionales en compuestos orgánicos:

Propiedades de la radiación electromagnética, regiones del espectro electromagnético y técnicas de análisis orgánico estructural.

Espectrofotometría visible (UV-vis), mecanismos de absorción molecular en el ultravioleta, transiciones electrónicas, reactivos de desplazamiento, efectos batocrómicos, hipsocrómicos, hipercrómicos e hipocrómicos. Aplicaciones de la espectrofotometría ultravioleta como sistema de detección en cromatografía líquida. (3 semanas)

Espectrometría Infrarroja (IR o FTIR), mecanismos de absorción molecular en el infrarrojo, modos de vibración en el infrarrojo, aplicaciones del espectro infrarrojo medio en el análisis orgánico estructural. Preparación de muestras Interpretación de espectros infrarrojos, análisis preliminar por regiones, región de los estiramientos A-H y heteroátomos, instauraciones, región de los triples enlaces y dobles enlaces acumulados, región de los dobles enlaces, tipos de grupos metilo. Región de la huella dactilar. Confirmación de grupos funcionales. (3 semanas)

Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) fundamentos del fenómeno de resonancia magnética. Distribución de Boltzman, equivalencia química, equivalencia magnética, desplazamiento químico, constante de acoplamiento J, 1D ¹H-NMR, 1D ¹³C-NMR, DEPT, J-MOD, experimentos bidimensionales homonucleares, COSY, HMQC, HMBC, INADEQUATE. (4 semanas)

Espectrometría de masas (MS), Historia de la espectrometría de masas, fundamentos de los procesos de ionización, impacto electrónico, ionización química positiva, ionización química negativa, FAB, electrospray, MALDI, analizadores, inserción directa, acoplamiento del espectrómetro de masas con otras técnicas, GC-EIMS, HPLC-ESI-MS. Análisis sistemático de espectros de masas, identificación del pico del ión molecular, pico base, indicadores de heteroátomos, nitrógeno, regla del nitrógeno, halógenos, azufre,

oxígeno, fósforo. Análisis aritmético, Fragmentación de hidrocarburos, análisis mecanístico, tipos generales de fragmentación (A_1 , A_5 , B, A_2), Clivage cerca enlaces dobles (A_3 , D, A_4), Rearreglos (E_1 , H McLafferty, E_2 , F, G), resumen de los patrones de fragmentación por grupos funcionales en impacto electrónico. (3 semanas).

CONTENIDO LABORATORIO :

- 1.** Determinación de constantes físicas, análisis cualitativo elemental, pruebas de solubilidad y pruebas características de los grupos funcionales.
- 2.** Análisis de la muestra problema No 1 y No 2 (Líquida y/o sólida). Determinación de las constantes físicas. Análisis eleven tal. Pruebas de solubilidad. Determinación de grupos funcionales presentes. Preparación del derivado.
- 3.** Análisis de la muestra problema No 3. Se seguirán los mismos procedimientos de la muestra No 1, pero se dará un espectro correspondiente a la sustancia de la muestra problema No 2.
- 4.** Análisis de la muestra problema No 4. En esta muestra problema, el alumno deducirá la estructura a partir de los espectros dados y de información adicional sobre el compuesto en mención.
- 5.** Análisis de una mezcla. Ensayos preliminares. Separación y purificación de los compuestos. Identificación de los mismos.

BIBLIOGRAFIA.

- SHRINER, R. FUSON, F. CURTIN, D. Identificación Sistemática de Compuestos Orgánicos. Editorial Limusa S.A 1ra edición. Mexico, 1.977.
- CHERONIS, N.D. ENTRIKIN, J. Identificación of Organic Compounds. Wiley International Edition. New York, 1.963.
- CONANT, J. B. BLATT, A. H. Química de los compuestos orgánicos. Editorial Aguilar, Madrid, 1970.
- OPENSHAW, H.T. Manual de laboratorio de Análisis Orgánico Cualitativo. Editorial Alhambra S.A Mexico, 1.963
- ALZATE, R. Analisis Orgánico. Universidad nacional de Colombia. Seccional Manizales. 1987.

METODOLOGÍA

El curso se desarrollará mediante exposición magistral por parte del profesor de los conceptos fundamentales involucrados en las etapas de identificación de una muestra desconocida, así como la aplicación a través de ejercicios explicativos. Además, se asignarán tareas complementarias.

Con relación a la parte práctica, el alumno trabajará individualmente contantodo con la sesoria del profesor e instructor en la identificación de las siguientes muestras desconocidas: dos (2) muestras de compuestos puros y una (1) mezcla a través del análisis orgánico tradicional y dos (2) muestras que identificará mediante las técnicas espectroscópicas.

Zuluaga F.C INSUASTY B.O. YATES B. Análisis Orgánico Clorito y Espectral. Facultad de Ciencias Departamento de Química Universidad del Valle. Santiago de Cali. 2000 179p

EVALUACION:

La asignatura se evaluará de la siguiente manera: la parte teórica un 30 % y la parte práctica un 70 % distribuidos, así para cada uno:

Parte Teórica:	1 Parcial	10 %
	1 Examen Final	15 %
	Ejercicios	5 %
Parte Práctica:	1ª y 2ª Muestra	10 % c/u
	3ª y 4ª Muestra	15 % c/u
	Mezcla	20 %

DURACION TIEMPO POR UNIDADES:

Parte Teórica:

Unidad 1	Una semana
Unidad 2 y 3	Dos semanas
Unidad 4	Dos semanas
Unidad 5	Tres semanas
Unidad 6	Una semana
Unidad 7	Tres semanas
Unidad 8	Cuatro semanas

Parte Práctica

Muestra Problema 1 y 2	Cinco semanas
Muestra Problema 3	Tres semanas
Muestra Problema 4	Tres semanas
Muestra Mezcla	Cinco semanas