

Universidad Nacional de La Plata
Facultad de Ciencias Exactas

Espectros, Espectrómetros y espectrometrías de masa

Responsables: Dr. Jorge Javier Pedro FURLONG y Dra. Patricia Ercilia ALLEGRETTI
Curso cuatrimestral con una carga horaria total de 45 horas.

Modalidad: Teórico-práctica
Evaluación final escrita.

Dirigido a Licenciados en Química, Bioquímica, Farmacéuticos, Ingenieros Químicos.

PROGRAMA

1- Introducción

Formación del espectro de masa. Análisis de masas y abundancias iónicas. Información estructural.

2- Espectrómetros de masa.

Ionización. Analizadores. Fundamentos físicos. Detectores. Sistemas de introducción de muestras.

3- Espectrometrías de masa.

Métodos de ionización. Muestras de baja volatilidad. Técnicas auxiliares. Sistemas acoplados.

4- Información básica de los espectros de masa.

Composición elemental. El ión molecular. Perfil espectral. Interpretación de espectros.

5- Teoría de las descomposiciones unimoleculares.

Energía, probabilidad y velocidad. Diagramas de Wharhaftig. Efectos cinéticos y termodinámicos. La teoría del quasi-equilibrio. Estimación de la función probabilidad $k(E)$. Relaciones termoquímicas. Ejemplos.

6- Mecanismos de fragmentación iónica.

Factores que afectan la abundancia iónica. Reacciones iniciadas en sitios radicales y cargados. Disociación de uniones sigma. Reacciones de alfa-ruptura y de ruptura inductiva. Descomposición de estructuras cíclicas. Reordenamientos de sitios radicales y cargados. Reordenamientos de hidrógeno.

7- Espectros de masa de clases de compuestos.

Hidrocarburos. Alcoholes. Aldehidos y cetonas. Esteres. Acidos y anhídridos. Eteres. Tioles y tioéteres. Aminas, Amidas y Nitrilos. Haluros alifáticos.

8- Identificación computarizada con espectros de masa.

Descripción y objetivos:

El desarrollo increíble de los métodos físicos en química orgánica en las últimas décadas ha cambiado en forma sustancial la tarea de determinación estructural. La importancia de estos métodos requiere un amplio conocimiento de las distintas técnicas a fin de facilitar la investigación de estructuras. El curso está dedicado al estudio de la espectrometría de masa: conceptos básicos teóricos y fenomenológicos involucrados, instrumentación y muestreo, sistematización posible en el procedimiento de interpretación de espectros, análisis de espectros de grupos de sustancias, técnicas instrumentales auxiliares y aplicaciones. El objetivo primordial implica que el participante, una vez aprobado el curso, no sólo entenderá el significado de los espectros que examina sino además, por un lado, sabrá como aprovechar la información que proveen y conectarla convenientemente con la de otro orden (químico o de

otras espectrometrías) para llevar a cabo la elucidación de estructuras y, por otro lado, será capaz de planificar su uso para resolver un problema particular.

Consultas:

Prosecretaría de Posgrado de la UNLP

Tel: 54-221-4236309

Mail: posgradounlp@presi.unlp.edu.ar

Página Web de la Facultad: www.exactas.unlp.edu.ar