

PROGRAMA ANALITICA A CURSULUI DETERMINAREA STRUCTURII COMPUȘILOR BIOORGANICI

Specializarea: Biochimie tehnologică, anul de studii: III, semestrul II

Anul universitar: 2008-2009

1. Obiectivele cursului:

Acest curs se preda studentilor sectiei chimie, anul III, reprezinta unul dintre cursurile de baza, tinand cont de faptul ca chimia organica include sinteza compusilor, mecanismele reactiilor implicate in aceste sinteze si stabilirea structurii compusilor rezultati.

Prin continutul lui, cunostintele predate pot servi atat profesorilor care predau chimia in licee, cat si chimistilor care lucreaza in laboratoarele de cercetare din diferite institute sau intreprinderi chimice, eventual fabrici de medicamente.

In cadrul cursului se pune accent deosebit pe metodele fizice de stabilire a structurii compusilor organici, metode moderne care au avantajele de a utiliza cantitati foarte mici de substante, de a oferi informatii mai multe, dar necesita mijloace de investigatie mult mai costisitoare.

In cadrul lucrarilor de laborator se efectueaza reactii de identificare, dozare si stabilire de structura prin metode chimice. Continutul principal al lucrarilor de laborator il constituie inregistrarea si rezolvarea spectrelor de RMN, SM, IR, UV-VIS care servesc in continuare la stabilirea structurii compusilor organici din diferite clase.

2. Continutul de baza:

I. Metode chimice de analiza.

1. Metode de fractionare a amestecurilor de compusi organici.
2. Solubilitatea compusilor organici.
3. Reactii pentru identificarea, dozarea si stabilirea structurii: alcoolilor si polioliilor, compusilor carbonilici, derivatilor functionali ai acizilor carboxilici, aminelor si oximelor.

II. Metode fizice de analiza structurala organica.

1. Spectrometrie de masa.
 - * Transformarile compusilor organici in spectrometria de masa.
 - * Aspecte teoretice si aparatura in spectrometria de masa.
 - * Tipuri de ioni.
 - * Picuri izotopice.
 - * Reguli generale de fragmentare.
 - * Fragmentari simple.
 - * Fragmentari insotite de transpozitia unui hidrogen.
 - * Fragmentari complexe.
 - * Fragmentari insotite de transpozitia a doi hidrogeni.
 - * Fragmentari insotite de transpozitia unor grupari atomice (transpozitia de schelet).
 - * Spectre de masa ale unor clase de compusi organici :
 - Spectre de masa ale hidrocarburilor
 - Spectre de masa ale alcoolilor si fenolilor
 - Spectre de masa ale eterilor
 - Spectre de masa ale aminelor.
 - Spectre de masa ale mercaptanilor, sulfonelor si sulfurilor.

- Spectre de masa ale compusilor halogenati .
- Spectre de masa ale aldehydelor si cetonelor.
- Spectre de masa ale acizilor carboxilici.
- Spectre de masa ale esterilor
- Spectre de masa ale amidelor.
- Spectre de masa ale nitrililor.
- Fragmentarea heterociclorilor cu inele de 5 si 6 atomi cu un heteroatom.
- Determinarea formulei moleculare prin intermediul spectrometriei de masa.

2.Spectrometrie de RMN.

*Introducere. Principiile spectrometriei RMN. Spinul nuclear. Interactiunea spinului nuclear cu campurile magnetice B_0 si B_1 . Procese de relaxare. Aparatura. Deplasare chimica. Intensitatea semnalelor si numarul de protoni. Cuplajul spin – spin, sisteme de spini . Metode de simplificare a spectrelor de RMN. Marcarea cu deuteriu. Dubla iradiere. Efectuarea spectrelor la campuri mai puternice. Utilizarea reactivilor deplasarii chimice. Exemple de spectre ale unor compusi organici din diferite clase. Studiul legaturilor de hidrogen. Fenomene dependente de timp. Rezonanta magnetica nucleara dinamica :

- schimbul de protoni
- rotatia in jurul unei legaturi simple impiedicata steric sau cu caracter partial de dubla legatura
- inversia ciclului
- inversia configuratiei
- migrarea valentelor.

3.Spectrometria in IR

*Interactiunea dintre radiatiile IR in molecule. Vibratiile normale in moleculele poliatomice. Relatii intre intensitatea benzilor de absorbtie si structura compusilor organici. Factorii care influenteaza pozitiile benzilor de absorbtie in IR :

- factori externi (experimentali) ;
- factori interni (structurali).

Influenta efectelor sterice si a conformatiilor moleculare asupra spectrelor de IR (analiza conformationala).

3.Spectrometria in UV-VIS

*Principiile spectroscopiei UV-VIS.

*Relatii intre structura compusilor organici si spectrele de UV-VIS.

*Absorbtile caracteristice diferitelor tipuri de compusi organici.

*Compusi continand numai electroni π

*Compusi saturati continand numai electroni p :

*Compusi conjugati -cumai multi cromofori conjugati ($\pi - \pi$) ;

*Sisteme aromatice :

-cu substituenti auxocromi ;

-cu substituenti cromofori ;

*Influenta factorului stereochemic

*Influenta solventului

3. Sistemul de evaluare al studentului :

- scris ;
- oral, la cererea studentilor.

4.Bibliografie curs :

- 1.Avram M., Tataru E., Spectroscopia in infrarosul, aplicatii in chimia organica, Bucuresti, 1966.
- 2.Ioan Oprea, Spectroscopia de masa a compusilor organici, 1974.

- 3.Sorin Mager, Analiza structurala organica, 1983.
- 4.Ioan Druta, Stabilirea structurii compusilor organici, 1987.
- 5.William Kemp, Organic Spectroscopy, Sec.Ed., 1987.
- 6.Ioan Druta, Note de la cursul « Analiza organica elementala, functionala si structurala" »

5. Tematica lucrarilor de laborator si a seminarilor

I.Analiza elementala cantitativa a carbonului, hidrogenului, azotului.

II.Analiza functionala calitativa si cantitativa.

1. Dozarea fenolului.
2. Determinarea compusilor nesaturati prin aditie de halogen.
3. Dozarea acetonei.
4. Dozarea iodometrica a fenilhidrazinei
5. Dozarea aminelor
6. Dozarea aldehydelor si cetonei cu hidroxilamina
7. Dozarea alcoolului etilic
8. Determinarea calitativa a halogenilor
9. Impartirea substantelor organice si biochimice in grupe dupa solubilitate

III.IV. Analize spectrale

- 1.Efectuarea si interpretarea spectrelor de RMN
- 2.Efectuarea si interpretarea spectrelor de IR si UV-VIS.
3. Determinari de structuri prin spectre de IR, RMN, SM, UV-VIS – exercitii si probleme.

6. Bibliografie laborator (seminar) :

- 1.Albert F., Barbulescu N., Holszky C., Grekk C., Analiza chimica organica, Bucuresti, 1970.
2. Bauer H., Moll H., Die organische analyse, Leipzig, Akad Verlag, 1960.
3. A.T. Balaban, M. Banciu, I. I. Pogany, Aplicatii ale metodelor fizice si chimice in chimia organica, 1983.
4. R. Dyer, Organic Spectral Problems, Prentice Hall, Inc. Englewood Cliffs, N.J., 1972.

Titular de disciplina,

Lect.dr. Ramona Dănac