



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
Departamento de Química Orgánica

11 90
1980.

QUIMICA ORGANICA III

1er Cuatrimestre 1980

PROFESORES: Dr. Alberto Cerezo, Dra. Alicia Fernández Cirelli y
Dr. Carlos R. Portal.

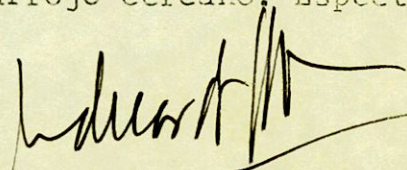
1 - ESPECTROSCOPIA ULTRAVIOLETA

Introducción a la espectroscopía visible y ultravioleta. Presentación de los datos espectrales. Modos de excitación electrónica. Correlaciones espectrales. Olefinas. Cetonas no saturadas u otros derivados carbonílicos, compuestos aromáticos, cromóforos diversos. Aditividad de cromóforos. Preparación de muestras.

Leyes de absorción de la luz. Transiciones electrónicas. Cambios de configuración electrónica por absorción de la luz. Reglas de selección. Diagrama de niveles energéticos: Diagrama de Jablonski. Procesos de emisión: radiactivos y no radioactivos. Fluorescencia. Fosforescencia. Rendimiento cuántico. Introducción a la mecánica cuántica. Función de onda. Energía potencial de los diferentes estados. Principio de Franck-Condon. Espectros de absorción y de emisión según los correspondientes diagramas de energía potencial vs. distancia interatómica. Aplicaciones de la espectroscopía UV. Tautomería ceto-enólica. Isomería cis-trans. Efectos estéricos. Efectos de la sustitución en compuestos aromáticos.

2 - ESPECTROSCOPIA INFRARROJA

Introducción. El espectro electromagnético. Espectros de absorción vibracional de moléculas diatómicas. Vibraciones activas en el infrarrojo. Moléculas poliatómicas. Determinación del espectro. Bandas de absorción características. Interpretación de espectros. Espectroscopía Raman. Utilidad del IR. (Problemas espectrales infrarrojo). Preparación de las muestras. Disolventes, materiales de la celda. Espectroscopía del infrarrojo cercano. Espectroscopía del infrarrojo lejano.


1112
Dr. EDUARDO G. GROS
Director Dto. Química Orgánica

3 - RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR

Origen del desplazamiento químico. Determinación del desplazamiento químico R.M.N. aplicada al hidrógeno. Desplazamiento químico de otros núcleos. Interacciones nucleares de spin-spin. Acoplamiento virtual. Acoplamiento de spin-spin entre núcleos químicamente idénticos. Desacoplamiento de spin. Interpretación de sistemas de spin sencillos. Aplicaciones cuantitativas de la R.M.N. Preparación de la muestra. Problemas espectrales en R.M.N.

4 - ESPECTROMETRIA DE MASAS

Introducción. Instrumentación. Manejo de las muestras. Características generales de los espectros de masa. Determinación de fórmulas y pesos moleculares. Producción y fragmentación de iones. Factores que gobiernan la fragmentación de iones. Métodos de estudio de los procesos de fragmentación. Picos de iones inestables. Marcaje isotópico. Espectros de masas de algunos compuestos representativos: hidrocarburos, compuestos halogenados, alcoholes, éteres, aldehidos y cetonas, ésteres, ácidos, anhídridos, aminas, amidas nitrocompuestos, epónidos. (Problemas de espectrometría de masas).

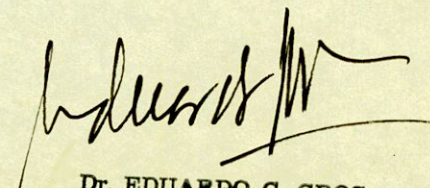
5 - ^{13}C -RMN Introducción. Sensibilidad del núcleo ^{13}C respecto a ^1H .

Fundamentos. Mecanismos de relajación: Relajación spin-retículo o longitudinal (T_1) y relajación spin-spin o transversal (T_2). Relajación dipolo-dipolo ^{13}C - ^1H intramolecular.

Desacoplamientos: total y parcial. Espectros de rutina. Técnicas NORD y SFORD. Efecto nuclear de Overhauser (NOE)

13

Interpretación de espectros de ^{13}C -RMN : solventes y desplazamientos químicos. Alcanos: Regla de Lindeman y Adams. Compuestos alicíclicos. Alcoholes. Acidos. Aminas. Haluros. Alquenos: Método empírico para calcular desplazamientos químicos en alquenos acíclicos. Alenos. Alquinos. Aromáticos. Asignaciones espectrales en base a mediciones de relajación. Efectos estéricos y efectos de solvente. Heteroaromáticos. Compuestos carbonílicos. Amidas y nitrilos. Técnicas: Técnica de onda continua (CW-RMN) y técnica de pulsos con transformador de Fourier (FT-RMN). Ventajas y limitaciones.



Dr. EDUARDO G. GROS
Director Dto. Química Organica

1113.

6 - PROBLEMAS ESTRUCTURALES

Manejo y correlación de datos espectrales en forma conjunta con resultados de reacciones químicas. Problemas que incluyen espectros I.R. U.V. R.M.N. y E.M.

7 - MODERNOS PROCEDIMIENTOS PARA LA DETECCION E IDENTIFICACION DE TRAZAS DE PRODUCTOS ORGANICOS.

Cromatografía en fase gaseosa: CGL y CGS. CGL: Soportes y fases. Aplicación. Detectores: Ionización de llama (FID), de conductividad térmica, de llama alcalina (N-FID y P-FID), de captura electrónica. Fundamentos, sensibilidad y aplicabilidad. Sistema acoplado cromatógrafo de gases-espectrómetro de masas con procesador electrónico de datos. Interfases. Sistema de almacenamiento de datos. Aplicaciones. Ejemplos.

BIBLIOGRAFIA:

D.J. Pasto y C.R. Johnson- DETERMINACION DE ESTRUCTURAS ORGANICAS
Ed. Reverté 1974

R.M. Silverstein y G.C. Bassler - SPECTROMETRIC IDENTIFICATION OF ORGANIC COMPOUNDS - Ed. Wiley & Sons. 1964

J.F. Dyer - APLICACIONES DE ESPECTROSCOPIA DE ABSORCION EN COMPUESTOS ORGANICOS. Ed. Prentice Hall. 1973

K. Nakenishi - INFRARED ABSORPTION SPECTROSCOPY - Ed. Holden - Day Inc. 1962

C.N. Rao - ESPECTROSCOPIA ULTRAVIOLETA Y VISIBLE - Ed. Alhambra 1970

J. Morcillo Rubio - ESPECTROSCOPIA INFRARROJA - Monografías OEA (Ser. Quím.) N°12 - 1974

D.R. Gottlieb & R. Braz Filho - INTRODUCCION A LA ESPECTROMETRIA DE MASA DE SUSTANCIAS ORGANICAS - Monografías OEA.

F. Joseph-Mathan - RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR DE HIDROGENO- Monografía OEA (Ser Quím.) N°9 1973

J. Seibl. ESPECTROMETRIA DE MASAS - Ed. Alhambra 1973

F.W. Mc. Lafferty - INTERPRETACION DE LOS ESPECTROS DE MASAS
Ed. Reverté 1974

D.D. Mathieson - NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE FOR ORGANIC CHEMISTS
Ed. Academic Press, Inc. 1967

R.M. Bible - INTERPRETACION OF N.M.R. SPECTRA - Ed. Plenum Press
1965

J.B. Stothers, CARBON-13 NMR SPECTROSCOPY, Academic Press, N.Y.
1972

E. Breitmaier y W. Voelter, ¹³C-NMR Spectroscopy, Verlag Chemie
1974

J.T. Clerc, E. Pretsch y S. Sternhell, ¹³C- Kernresonanzspektroskopie, Akademische Verlagsgesellschaft, Frankfurt a.M. 1973

Textos de ejercicios:

W. Simon - T. Clark - ELUCIDACION ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS ORGANICOS POR METODOS ESPECTROSCOPICOS - Vol. I (tablas). Vol. II (Problemas)
Ed. Alhambra 1976

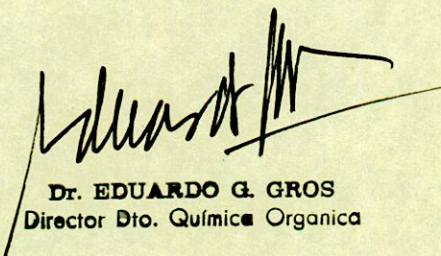
D.W. Williams - J. Fleming - SPECTROSCOPIC PROBLEMS IN ORGANIC CHEMISTRY - Ed. Mc. Graw Hill 1967.

R.W. Shapiro - SPECTRAL EXERCISES IN STRUCTURAL DETERMINATION OF ORGANIC COMPOUNDS - Ed. Hold, Rinehart & Viaston Ind. (Interamericana) 1969

J.F. Dyer - PROBLEMAS ESPECTRALES DE QUIMICA ORGANICA

Ed. Prentice Hall - 1973

¹³
Levy C- RMN FOR ORGANIC CHEMISTS



Dr. EDUARDO G. GROS
Director Dto. Química Organica