

3 Q. O.  
1982

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
DEPARTAMENTO DE QUIMICA ORGANICA

ASIGNATURA: QUIMICA ORGANICA III

CARRERA: LIC. EN CIENCIAS QUIMICAS PLAN: Vigente

CARACTER: OBLIGATORIA

DURACION DE LA MATERIA: 1 cuatrimestre (1er cuatrimestre 1982)

HORAS DE CLASE a) Teóricas: 3 horas semanales Problemas: 3 horas sem.  
Prácticas: 8 " " Totales: 14 horas semanal.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: QUIMICA ORGANICA II.

PROGRAMA

1 - Espectroscopía ultravioleta

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 no radiantes. 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.

Determinación del espectro ultravioleta. Descripción del aparato, preparación de las muestras, solventes. Presentación de los datos espectrales. Aplicaciones de la espectroscopía UV en Química Orgánica. Reglas de Woodward - Fieser.

2 - Espectroscopía infrarroja

El espectro electromagnético. Energía vibracional de una molécula diatómica. Espectros de absorción vibracional de moléculas diatómicas. Moléculas poliatómicas. Número de vibraciones independientes. Vibraciones activas en el infrarrojo. Frecuencia de las vibraciones. Vibraciones normales, sobretonos y tonos de combinación. Determinación del espectro infrarrojo. Descripción del aparato, preparación de las muestras, solventes, celdas. Posiciones de las bandas e intensidades. Utilidad de la espectroscopía IR. Absorciones características de las diferentes funciones químicas. Interpretación de espectros.

Aprobado por Resolución *CA 118/82*

3 - Resonancia magnética nuclear protónica

Resonancia nuclear, procesos de relajación, saturación. Apantallamiento magnético de los núcleos, desplazamiento químico, escalas  $\delta$  y  $\tau$ , hidrógenos equivalentes. Correlación del desplazamiento químico en la estructura molecular, aditividad de los efectos de sustituyentes. Acoplamiento spin-spin, distintos casos. Constante de acoplamiento, acoplamiento de largo alcance. Variación de la constante de acoplamiento con la geometría del sistema. Desacoplamiento, técnica de doble resonancia. Hidrógeno unido a oxígeno y nitrógeno. Intercambio químico. Determinación de espectros: Descripción somera del equipo. Preparación de muestras, uso de standards. Variaciones del espectro con la temperatura y el solvente. Interpretación de espectros de compuestos orgánicos con distintas funciones químicas.

4 - Resonancia magnética nuclear de  $^{13}\text{C}$

13

Introducción. Sensibilidad del núcleo de  $^{13}\text{C}$  frente al núcleo de  $^1\text{H}$ . Procesos de relajación: Relajación spin-retículo o longitudinal, relajación spin-spin o transversal. Desacoplamiento protónico. Métodos de desacoplamiento. Desacoplamiento de banda ancha, desacoplamiento "off resonance" y desacoplamiento en frecuencia única. Efecto nuclear Overhauser (NOE) Espectroscopía de pulsos con transformación de Fourier. Características espectrales: desplazamiento químico, acoplamiento spin-spin y área de los picos y su integración. Interpretación de espectros de compuestos orgánicos con distintas funciones químicas.

5 - Espectrometría de masas.

Introducción a la espectrometría de masas. Fundamentos. Técnica. Introducción de las muestras. Producción de iones. Separación de masas. Características generales de los espectros de masa. Determinación de peso molecular y fórmula molecular. Fragmentación de iones positivos y factores que gobiernan la fragmentación de iones. Potencial de ionización. Métodos de estudio de los procesos de fragmentación. Picos de iones inestables. Marcaje isotópico. Procesos de ruptura simple. Procesos que ocurren con reordenamiento. Procesos de ruptura compleja. Procesos que ocurren con doble reordenamiento. Espectros de masa de compuestos con distintos grupos funcionales. Interpretación de espectros de masa.

6 - Modernos procedimientos para la detección e identificación de trazas de productos orgánicos.

Cromatografía en fase gaseosa. CGL: Soportes y fases. 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.

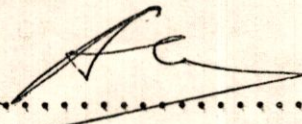
BIBLIOGRAFIA:

- D.J. Pasto y C.R. Johnson - DETERMINACION DE ESTRUCTURAS ORGANICAS  
Ed. Reverté 1974
- R.M. Silverstein, G.C. Bassler y T.C. Morrill - SPECTROMETRIC  
IDENTIFICATION OF ORGANIC COMPOUNDS - Ed. Wiley & Sons. 1974
- J.F. Dyer - APLICACIONES DE ESPECTROSCOPIA DE ABSORCION EN COMPUESTOS  
ORGANICOS. Ed. Prentice Hall 1973
- J. Morcillo Rubio - ESPECTROSCOPIA INFRARROJA - Monografías OEA  
(Ser. Quím.) N° 12 - 1974
- D.R. Gottlieb y R. Braz Filho - INTRODUCCION A LA ESPECTROMETRIA DE  
MASA DE SUSTANCIAS ORGANICAS - Monografías OEA
- F. Joseph-Mathan - RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR DE HIDROGENO - Mon-  
grafia OEA (Ser Quím.) N°9 1973
- G.C. Levy y G.L. Nelson - Carbon-13 Nuclear Magnetic Resonance for  
Organic Chemists - Wiley - Interscience - 1972

TEXTOS DE CONSULTA:

- C.N. Rao - ESPECTROSCOPIA ULTRAVIOLETA Y VISIBLE - Ed. Alhambra 1970
- H. H. Yaffé y M. Archin - THEORY AND APPLICATION OF ULTRAVIOLET  
SPECTROSCOPY - John Wiley and Sons, Inc. - 1966
- K. Nakanishi y P.H. Solomon - INFRARED ABSORPTION SPECTROSCOPY - Ed.  
Holdon - Day Inc. 1977.
- Morcillo, Y y Madroñero, R. "Aplicaciones Prácticas de la Espectroscopia  
Infrarroja" - Ed. Santillana S.A., Madrid - 1962
- D.D. Mathieson - NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE FOR ORGANICA CHEMISTS  
Ed. Academic Press, Inc. 1967
- R.M. Bible - INTERPRETATION 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, <sup>13</sup>C-NMR Spectroscopy, Verlag Chemie 1974
- J. Seibl. ESPECTROMETRIA DE MASAS - Ed. Alhambra 1973
- F.W. Mc. Lafferty - INTERPRETACION DE LOS ESPECTROS DE MASAS - Ed.  
Reverté 1974

Fecha .....

Firma Profesor ..... 

Firma Director .....

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

Espectroscopia ultravioleta

.....  
..... de absorción de la luz. Transiciones  
..... continuación electrónica por absorción  
..... Diagrama de niveles en estado  
..... Procesos de emisión no radiantes. Fluorescencia. Rendimiento cuántico.  
..... Introducción a la mecánica cuántica. Función de onda. Potencial de los diferentes estados. Principios de los espectros de absorción y de emisión.  
..... Determinación del espectro ultravioleta. Preparación de las muestras, solventes, filtros espectrales. Aplicaciones de la espectroscopia orgánica. Reglas de Woodward - Fieser.

Espectroscopia infrarroja

El espectro electromagnético. Energía vibracional. La diatómica. Espectros de absorción vibracional. Moléculas poliatómicas. Número de grados de libertad. Vibraciones activas en el infrarrojo. Las vibraciones. Vibraciones normales, combinadas y combinación. Determinación del espectro infrarrojo. Descripción del aparato, preparación de las muestras, filtros. Posiciones de las bandas e intensidades. Utilización de la espectroscopia IR. Absorciones características de las diferentes clases de compuestos químicos. Interpretación de espectros.

Aprobado por Resolución CA 116182