

5.90  
1985

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

---

ASIGNATURA: Química Orgánica III  
CARRERA: Licenciatura en Ciencias Químicas  
PLAN: Vigente  
CARACTER: Obligatoria  
DURACION DE LA MATERIA: Un cuatrimestre (1º cuat. 1985)  
HORAS DE CLASE: a) Teóricas= 4 hs. semanales  
                  b) Prácticas= 8 hs. semanales  
                  c) Problemas= 4 hs. semanales  
                  Totales= 16 hs. semanales  
ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Química Orgánica 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 - Diagramas de niveles energéticos: Diagramas de Jablonski - Procesos de emisión no radiante - Fluorescencia - Fosforescencia - Pendimiento 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 - Frecuencias 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 -

3- Espectrometría de masa

Introducción a la espectrometría de masa - Fundamentos - Técnica - Introducción de las muestras - Sistemas de producción de iones - Sistemas de enfoque de iones (simples y múltiples - 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 - Iones metaestables - Marcaje isotópico - Procesos de ruptura simple - Procesos que ocurren con doble reordenamiento - Espectros de masa de compuestos con distintos grupos funcionales - Interpretación de espectros de masa -

tc

#### 4- Resonancia magnética nuclear

Introducción - Spin nuclear y momento magnético - El fenómeno de P.M.N. - Dependencia de la magnetización nuclear con el tiempo - Observación de la P.M.N. - Técnicas continuas, pasaje lento y pasaje rápido - Espectros de absorción y dispersión - Técnicas pulsadas, el sistema de ejes de referencia rotante - Introducción de la magnetización nuclear y decaimiento libre - Relajación del spin nuclear - Tiempo de relajación longitudinal y transversal ( $T_1$ ,  $T_2$  y  $T_2^*$ ) - Análisis y transformación de Fourier - Desplazamiento químico ( $\delta$ ) - Rango de de los núcleos más comunes - Mecanismo de relajación del spin nuclear: Introducción de spin-spin y spin-red - Relajación dipolo-dipolo, cuadrupolar y escalar - Nociones de relajación spin-rotación y por anisotropía de desplazamiento química - Sistemas de spin: partición por acoplamiento de spin - Teoría elemental, mecanismo de acoplamiento desdoblamiento de los niveles de energía de los núcleos - Acoplamiento a larga distancia - Determinación de la multiplicidad de las señales - Casos de dos spines (AX) - Análisis de espectros de segundo orden y su cálculo teórico (A B) - Caso de tres spines (AMX) - Diversos tipos de ABC, AB<sub>2</sub> y ABX - Cálculo teórico para el caso ABX - Relaciones entre la constante de acoplamiento (J) y la estructura y estereo química de compuestos orgánicos - Análisis de casos particulares de acoplamiento  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$ ,  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  y  $^{13}\text{C}$ - $^{13}\text{C}$  -

Doble resonancia - Teoría elemental - El efecto nuclear de Overhauser - Desacoplamiento homonuclear y heteronuclear - Aplicaciones de R.M.N.- C: desacoplamiento de protones total; desacoplamiento selectivo; desacoplamiento fuera de resonancia - RMN- $^1\text{H}$  - Desplazamiento químico de  $^1\text{H}$ , factores que lo afectan - Efecto de la densidad electrónica y la anisotropía magnética - Corrientes de anillos - Uso de RMN- H en la elucidación de estructuras de compuestos orgánicos - Interpretación de espectros - Uso de reactivos de desplazamiento - RMN- $^{13}\text{C}$  - Desplazamiento químico de  $^{13}\text{C}$ , factores que lo afectan - Efectos  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  y  $\delta$  - Uso de RMN  $^{13}\text{C}$  en la elucidación de estructuras de compuestos orgánicos - Interpretación de espectros -

#### 5- Modernos procedimientos para la detección e identificación de trazas de productos orgánicos

Cromatografía en fase gaseosa - DHI: 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 -

EE

## BIBLIOGRAFIA

- D.J. Pasto y C.R. Johnson - Determinación de Estructuras Orgánicas - 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 espectroscopía de absorción en Compuestos Orgánicos - Ed. Prentice Hall, 1973.
- J. Morcillo Rubio - Espectroscopía Infrarroja - Monografías OEA (Ser. Quím.) Nº 12, 1974.
- J. Seibl - Espectrometría de Masa - Ed. Alhambra, 1973.
- D.R. Gottlieb y R. Braz Filho - Introducción a la Espectrometría de masa de sustancias orgánicas - Monografías OEA.
- H.C. Hill, - Introduction to mass spectrometry - Heyden & Son, 1966.
- G.C. Levy y G.L. Nelson - Resonancia magnética nuclear de carbono 13 - Ediciones Bellaterra, 1976.
- P. Joseph-Nathan - Introducción a la espectrometría de RMN de protón y carbono-13, - Monografía OEA (Ser. Quím.)

## TEXTOS DE CONSULTA

- C.N. Rao - Espectroscopía ultravioleta y visible - Ed. Alhambra, 1970.
- H.H. Jaffé y M. Orchin - Theory and application of ultraviolet spectroscopy - John Wiley and Sons, Inc., 1966.
- K. Nakanishi y P.H. Solomon - Infrared absorption spectroscopy - Ed. Holden-Day Inc., 1977.
- Morcillo, Y y Madroñero, R - Aplicaciones prácticas de la espectroscopía infrarroja - Ed. Santillana S.A.-Madrid, 1962.
- D.D. Mathieson - Nuclear magnetic resonance for organic chemists - Ed. Academic Press, Inc., 1967.
- J.B. Stothers - Carbon-13 NMR spectroscopy - Academic Press-N.Y., 1972.
- E. Breitmaier y W. Voelter - c-NMR Spectroscopy - Verlag Chemie, 1974.
- F.W. McLafferty - Interpretación de los espectros de masas - Ed. Reverté, 1974.
- T.C. Ferrar y F. Becker - Pulse and Fourier transform NMR - Academic Press, 1971.
- H. Budzikiewicz, C. Djerassi y B.H. Williams - Interpretation of mass spectra of Organic Compounds - Holden-Day Inc, San Francisco, 1967.

MAR 1985

Fecha \_\_\_\_\_

Firma  
Profesor:

 Dr. E. G. Gros

Firma del  
Director:



Dra. N. SBARBATI NUDELMAN  
DIRECTOR INT. QUÍMICA ORGÁNICA