

79
DD

QUIMICA ORGANICA B

Programa Sintético

1er. Cuatrimestre 1977.

Profesores: Dres. E. G. Gros y N. Sbarbati de Nudelman.

Espectrometría de masa: Introducción. Fundamentos del método, utilidad en Química Orgánica, comparación con otros métodos espectrométricos. Instrumentación. Esquema de un espectrómetro de masa, sus distintas partes y funcionamiento, sistemas de introducción de muestras cámara de ionización, tubo analizador, sistema de detección registro, sistemas auxiliares, Espectrómetros de doble enfoque. Resolución. Aplicaciones. Procesos de ionización y fragmentación. Determinación del peso molecular, determinación de fórmula molecular distintos procedimientos. Procesos de fragmentación: fragmentación simple, procesos con reordenamiento, procesos complejos. Mecanismos. Interpretación de espectros de masa: procedimientos generales, determinación de estructuras.

Bibliografía

- F. W. Mc Lafferty, Interpretation of Mass Spectra, Benjamin, New York, 1967.
H. Hill, Introduction to Mass Spectrometry, Hayden an Son, London 1966.
Reed, Applications of Mass Spectrometry to Organic Chemistry, Academic Press, London, 1966.
K. Biemann, Mass Spectrometry, Organic Chemical Applications, Mc Graw Hill, New York, 1962.
H. Budzikiewicz, C. Djerassi and D. H. Williams, Mass Spectrometry of Organic Compounds, Holden-Day, San Francisco, 1967.

Espectrometría ultravioleta y visible. Conceptos básicos y métodos experimentales. Teoría elemental. Representación de espectros de absorción. Métodos y equipos, Cromóforos y transiciones. Moléculas simples: compuestos saturados conteniendo auxocromos, múltiples enlaces, grupo carbonilo, uniones nitrógeno-oxígeno y nitrógeno-nitrógeno. Moléculas conjugadas: dienos, polienos, compuestos carbonílicos alfa, beta no saturadas, compuestos dicarbonílicos. Reglas y correlaciones espectrales. Compuestos aromáticos; correlaciones de efectos de sustituyentes. Aplicaciones: identificación y asignación de estructuras: isomería cis-trans; efectos estéricos, aditividad de cromóforos.

Bibliografía

- Rao, "Ultraviolet and Visible Spectroscopy". Butterworths, London, 1961.
Schwarz, "Métodos físicos en Química Orgánica". Acribia, Zaragoza, 1961.

Pastor and Johnson, "Organic Structure Determination", Prentice-Hall Inc. N.J., 1968.

Jaffé and Orchin, "Theory and Applications of Ultraviolet Spectroscopy", J. Wiley and Son, N.Y., 1968.

Espectrometría infrarroja Teoría de absorción en el infrarrojo. Vibraciones moleculares y su interacción con la radiación infrarroja. Instrumentación y técnica para registrar espectros. Bandas de absorción características de grupo funcionales: unión carbono-hidrógeno, oxígeno-hidrógeno, nitrógeno-hidrógeno, carbono-carbono, carbono-oxígeno, carbono nitrógeno, nitrógeno-oxígeno, grupos funcionales. $X=Y=Z$. Factores que afectan las frecuencias de grupo: unión hidrógeno inter-intramolecular, cambios de masa (efecto isotópico), tensiones de anillo, conjugación, sustitución. Predicción de frecuencias de grupo. Reglas. Aplicaciones: identificación de sustancias, determinación de impurezas, control de reacciones y purificaciones, análisis cuantitativo, interpretación de espectros.

Bibliografía

Pastor and Johnson, "Organic Structure Determination", Prentice-Hall, Inc. N.J., 1969.

Skoog and West, "Principles of Instrumental Analysis", Holt, Rinehart and Winston, Inc., N.Y., 1971.

Bellamy, "The Infrared Spectra of Complex Molecules", Wiley, N.Y., 1958.

Nakanishi, "Infrared absorption Spectroscopy", Holden-Day, San Francisco, 1962.

Espectrometría de resonancia magnética nuclear. Utilidad del método en Química Orgánica relacionado con la determinación de estructuras. Propiedades magnéticas de núcleos atómicos y comportamiento de los mismos en un campo magnético. Acoplamiento químico. Teoría Corrientes diamagnéticas locales; en átomos aislados y en moléculas, anisotropía diamagnética, relación entre intensidad de campo y frecuencia de resonancia. Partición por acoplamiento de spin Teoría elemental, mecanismo de acoplamiento, desdoblamiento de niveles de energía de los núcleos. Determinación de multiplicidad de las señales en los diversos casos (según el valor de A/J). Casos de dos spins (AB). Análisis de espectros de segundo orden y cálculo teórico, sustitución isotópica, doble resonancia. Relaciones entre estructura y valor de J. Caso de tres spins (AMX) diversos tipos de ABC, AB_2 y ABX. Cálculo de los mismos en especial del ABX. Relaciones entre acoplamiento y estereoquímica de compuestos orgánicos.

Bibliografía

L. Jackman, Applications of NMR Spectroscopy in Organic Chemistry, Pergamon Press, N.Y., 1959.

K. Bible, Interpretation of NMR Spectra, Plenum Press, N.Y. 1967.

L. Mathieson, NMR for Organic Chemists, Academic Press, N.Y. 1967.

Bhacca and Williams, Applications of NMR Spectroscopy in Organic Chemistry, Holden Day, 1964.