

90 10  
(77)

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
Departamento de Química Orgánica

\*\*\*\*\*

QUIMICA ORGANICA III

1º Cuatrimestre 1977

PROFESORES: Dra. I.M. Thiel y Dra. Rosa M. de Lederkremer

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, y otros derivados carbonílicos, compuestos aromáticos, cromóforos diversos. Aditividad de cromóforos. Preparación de muestras.

2 - ESPECTROSCOPIA INFRARROJA

Introducción. Bandas de absorción características. Efecto de los isótopos. Interpretación de espectros. Preparación de las muestras. Disolventes, materiales de la celda. Espectroscopía del infrarrojo cercano. Espectroscopía del infrarrojo lejano. Espectros copia Raman. Problemas espectrales infrarrojo.

3 - DETERMINACION DE LA ESTEREOQUIMICA ABSOLUTA

Introducción. Dispersion óptica rotatoria. Regla del octante. Correlaciones de datos DOR en otros sistemas. Reglas de Brewster. Dicroismo circular.

4 - RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR

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

5 - RESONANCIA DE SPIN ELECTRONICO

Introducción. Los valores de g. Interacciones hiperfinas. Ejemplos de R.S.E. Aplicaciones de la espectroscopía R.S.E. en química orgánica. Interpretación del espectro R.S.E.

6 - ESPECTROMETRIA DE MASAS

Introducción. Instrumentación. Manejo de las muestras. Producción y reacciones de los iones gaseosos. Determinación de fórmulas y pesos moleculares. Fragmentación. Reagrupamiento. Picos de iones metaestables. Marcaje isotópico. Manejo y exposición de datos. Espectros de masas de algunos compuestos representativos. Problemas de espectrometría de masas.

7 - 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. E.M. y, cuando cabe, dispersión óptica rotatoria o espectros de R.S.E.

### 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.Nakanishi - INFRARED ABSORPTION SPECTROSCOPY - Ed. Holden - Day Inc. 1962.
- C.N. Rao - ESPECTROSCOPIA ULTRAVIOLETA Y VISIBLE - Ad. Alhambra. 1970.
- J.Morcillo Rubio - ESPECTROSCOPIA INFRARROJA - Monografias OEA (Ser.Quim.) N°12 - 1974.
- J.A. Mc.Millan - PARAMAGNETISMO ELECTRONICO - Monografias OEA. (Ser.Quim.) N°14. 1975.
- O.R. Gottlieb & R. Braz Filho - INTRODUCCION A LA ESPECTROMETRIA DE MASA DE SUSTANCIAS ORGANICAS - Monografias OEA. (Ser.Quim.) N°17 . 1976.
- P. Joseph-Nathan - RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR DE HIDROGENO - Monografias OEA. (Ser.Quim.) 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.H. Bible - Interpretation of N.M.R. Spectra - Ed. Plenum Press 1965.

### Textos de ejercicios:

- W.Simon - T. Clerk - ELUCIDACION ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS ORGANICOS POR METODOS ESPECTROSCOPICOS - Vol. I (tablas) Vol. II (Problemas) Ed. Alhambra 1970.
- D.W. Williams - J. Fleming - SPECTROSCOPIC PROBLEMS IN ORGANIC CHEMISTRY - Ed. Mc. Graw Hill. 1967.
- R.H. Shapiro - SPECTRAL EXERCISES IN STRUCTURAL DETERMINATION OF ORGANIC COMPOUNDS - Ed. Hold, Rinehart & Winston Ind. (Interamericana) 1969.
- J.F. Dyer - PROBLEMAS ESPECTRALES DE QUIMICA ORGANICA  
Ed. Prentice Hall - 1973.

Dr. EDUARDO G. GROS  
DIRECTOR Dto. QUIMICA ORGANICA