

QUIMICA ORGANICA "B"

Programa Sintético

Espectrometría de Masa. Introducción. Fundamentos del método, utilidad de Química Orgánica, comparación con otros métodos espectrométricos. Instrumentación. Esquema de un espectrómetro de masa, sus distintas partes y funcionamiento: sistemas de introducción de muestra, 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. L. Hill, Introduction to Mass Spectrometry, Hayden & Son, London, 1966.

Reed, Applications of Mass Spectrometry to Organic Chemistry, Academic Press, London, 1966.

K. Bremann, Mass Spectrometry, Organic Chemical Applications, Mc Graw-Hill, New York, 1962.

H. Dudzikiewicz, C. Djerassi and D. H. Williams, Mass Spectrometry of Organic Compounds, Holden-Day, S. 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 auxrocromos, múltiples enlaces, grupo carbonilo, uniones nitro-geno-oxígeno y nitrógeno-nitrógeno. Moléculas conjugadas: dienos, polienos, compuestos carbonílicos $\alpha\beta$ no saturados, compuestos dicarbonílicos. Reglas y correlaciones espectrales. Compuestos aromáticos: correlaciones de efectos de sustituyentes. Aplicaciones: identificación y asignación de estructuras; isomerismo *cis-trans*; efectos estéricos; aditividad de cromóforos.

Bibliografía

Rao, "Ultra violet and Visible Spectroscopy", Butterworths, London, 1961.

Schwarz, "Métodos físicos en Química Orgánica", Acribia, Zaragoza, 1968.

Pastor & Johnson, "Organic Structure Determination", Prentice-Hall, Inc., N.J., 1967.

Jaffé & Orcin, "Theory and Applications of Ultraviolet Spectroscopy", J. Wiley & Sons, N.Y., 1966.

Espectrometría infrarroja. Teoría de absorción en el infrarrojo. Vibraciones moleculares y su interacción con la radiación infrarroja. Instrumentación y técnicas para registrar espectros. Bandas de absorción características de grupos funcionales: unión carbono-hidrógeno, oxígeno-hidrógeno, nitrógeno-hidrógeno, carbono-carbono, carbono-oxígeno, carbono-nitrógeno, nitrógeno-nitrógeno, nitrógeno-oxígeno, grupos funcionales X-Y-Z. Factores que afectan las frecuencias de grupo: unión hidrógeno inter- e 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 & Johnson, "Organic Structure Determination", Prentice-Hall, Inc., N.J., 1967.

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

Bellamy, "The Infra-red Spectra of Complex Molecules", Wiley, N.Y., 1958.

Nakanishi, "Infra-red 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: 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, doblamiento de niveles de energía de los núcleos. Determinación de multiplicidad de los señales en los diversos casos (según el valor de $\Delta \nu / J$).

Caso de dos espines (AB). Análisis de espectros de segundo orden y cálculo teórico, sustitución isotópica, doble resonancia. Relaciones entre estructura y valor de J.

Caso de tres espines (AMX, diversos tipos de ABC, AB₂ y ABX). Cálculo de los mismos en especial del ABX. Relaciones entre acoplamiento y estequiometría de compuestos orgánicos.

Bibliografía

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

R. Bible, Interpretation of N.M.R. Spectra, Plenum Press, New York, 1965

D. Mathieson, N.M.R. for Organic Chemists, Academic Press, New York, 1967.

Bhecco & Williams, Applications of N.M.R. Spectroscopy in Organic Chemistry, Holden Day, 1964.