

QUIMICA ORGANICA B

Programa Sintético

1er. Cuatrimestre 1976

Profesores: Dres. E.G.Gros y E.Sanchez

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 and 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.

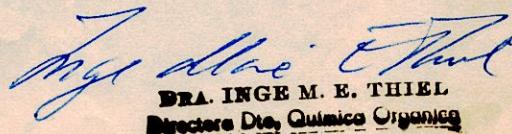
Espectrometría ultravioleta y visible. Conceptos básicos y métodos experimentales. Teoría elemental. Representación de espectros de absorción. Métodos y equipos, Cromóforos y transiciones. Moléculas simples: compuestos saturados conteniendo auxocromos, múltiples enlaces, grupo carbonilo, uniones nitrógeno-oxígeno 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, 1968.

Aprobado por Resolución

JNC. n° 048



DRA. INGE M. E. THIEL
 Directora Del. Química Orgánica

Pasto and Johnson, "Organic Structure Determination", Pre Inc. N.J., 1968.

Jaffé and Orchin, "Theory and Applications of Ultraviolet copy", J.Wiley and Son, N.Y., 1966.

Espectrometría infrarroja. Teoría de absorción en el infrarrojo molecular y su interacción con la radiación infrarroja. Instrumentación y técnicas para registrar espectros. Bandas de los grupos funcionales: unión carbono-oxígeno, 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 hidrocarbonada, inter-intramolecular, cambios de masa (efecto isotópico), tensión de anillo, conjugación, sustitución.

Predicción de frecuencias de grupo. Reglas.

Aplicaciones: identificación de sustancias, determinación de impurezas, control de reacciones y purificaciones, análisis cuantitativo e interpretación de espectros.

Bibliografía

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

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 Δ/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, AB₂, 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.

Aprobado por Resolución DNC n° 046

DRA. ING. M. A. TIRIBAL
Directora Dte. Química Orgánica