

QUIMICA ORGANICA ESTRUCTURAL Y ESPECTROSCOPICA

ESTRUCTURA ELECTRONICA DE LAS MOLECULAS

- 1.- Generalidades.- Interacción selectiva de la materia y la radiación. Plateamiento de la ecuación de Schrodinger. Simplificación. Factorización de las soluciones globales. Justificación de los distintos tipos de Espectroscopia.
- 2.- Orbitales atómicos. Orbitales moleculares. La molécula-ion de hidrógeno, como ejemplo de enlace localizado. Orbitales enlazantes y antienlazantes. Presencia de nodos. Valor de los coeficientes. Simetría de los orbitales. Enlaces localizados en las moléculas poliatómicas.
- 3.- El método LCAO aplicado al etileno. El butadieno, como ejemplo de enlaces deslocalizados. Orbitales Homo y Lumo. Simetría, Orbitales del benceno. Tipos de orbitales en las moléculas.

ESPECTROSCOPIAS FOTOELECTRONICAS

- 4.- Concepto de Espectroscopia fotoelectrónica (FE).- Espectroscopia Fe de ultravioleta. Información extraíble.-Tipos de espectros.- Ejemplos.
- 5.- Espectroscopia FE de rayos X (ESCA).- Espectroscopias relacionadas. Aplicaciones de la ESCA.-Ejemplos.

ESPECTROSCOPIA DE MASAS

- 6.- Descripción del espectrometro de masas. Sistemas de introducción.- Fuentes de iones. - Separación de iones.- Espectrómetros de un solo foco y de doble foco.-
- 7.- El ion molecular.- Dificultades de identificación.- Picos isotópicos en la región del pico molecular.- Derivados con azufre, cloro o bromo. Selección de la fórmula molecular con espectrómetros de baja y de elevada resolución.-Análisis isotópico.
- 8.- Procesos de fragmentación.- Presentación de los espectros de masas. Iones meta estables. Procesos típicos de fragmentación: escisiones homolíticas y eterolíticas.
- 9.- Fragmentaciones asociadas a grupos funcionales.- Hidrocarburos saturados.- Ejemplos.- Hidrocarburos aromáticos.-Ejemplos.
- 10.-Aldehidos y cetonas.- Trasposiciones de McLafferty.- Ejemplos.- Acidos y derivados.- Ejemplos.-Alcoholes y éteres. Ejemplos.

ESPECTROSCOPIA ULTRAVIOLETA

- 11.-Generalidades.- Regiones espectrales.- Ley de Beer-Lambert.-Técnica de la medida.- Espectrofotómetros de doble haz.- Cantidades utilizadas.
- 12.- Transiciones electrónicas en las moléculas.- Intensidades absolutas.- Transiciones de interés en Química Orgánica: transiciones N R, N V, y N Q.- Bandas de absorción. Relación entre las transiciones electrónicas y las vibracionales.- Principio de Franck-Condon.

- 13.- Exposición y discusión de resultados experimentales.- Compuestos no conjugados.- Dienos y enenas.-Reglas de Woodward-Fieser.-Acidos y derivados, insaturados.- Conjugación cruzada.
- 14.- Sistemas policonjugados.-Ejemplos representativos.- Absorción aromática.- Orbitales moleculares del benceno.- Bandas de absorción más características.
- 15.- Absorción ultravioleta y estereoquímica.- Coplanaridad en los bifenilos y otros sistemas.- Isómeros geométricos.- Efectos estereos en los pirazoles.

ESPECTROSCOPIA INFRARROJA

- 16.- Generalidades.- Moléculas diatómicas.-Moléculas poliatómicas.-Vibraciones normales o fundamentales.- Interpretación "química" de los espectros IR.
- 17.- Frecuencias características.- Constantes de fuerza de los enlaces. -Distribución general de las bandas en el espectro IR.
- 18.- Exposición y discusión de resultados experimentales.-Hidrocarburos saturados.- Vibraciones stretching y bending.-Hidrocarburos etilénicos y acetilénicos.- Hidrocarburos aromáticos.
- 19.- Compuestos carbolínicos.-Discusión del grupo carbonilo.-Cetonas abiertas y ciclí
Efectos modificativos.- Aldehidos.-Acidos y derivados.
- 20.- Compuestos hidroxílicos.- Puente de hidrógeno intra e intermolecular. Aminas y amidas.

ESPECTROSCOPIA DE RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR

- 21.- Generalidades.-Fundamento teórico.-Condición de resonancia.- Espectrómetros de frecuencia y de campo variable.
- 22.-Corrimiento químico y constante de blindaje.-Justificación.-Medición del corrimiento químico .-Escalas p.p.m.-Referencias. .
- 23.-Factores que afectan el corrimiento químico.- Efecto inductivo de los substituyentes. Efectos de la anisotropía de la susceptibilidad magnética de los enlaces.
- 24.- Correlaciones entre el corrimiento químico y la estructura molecular.- Empleo de las Tablas de correlación.- Valores representativos para los principales tipos de protones.- Reglas de Choolery y de Simón.
- 25.- Interacción spin-spin.-Justificación.-Constantes de acoplamiento.-Acoplamiento entre conjuntos de protones equivalentes.-Factores que afectan la constante de acoplamiento.-Planteamiento general del problema interpretativo.

Applications of Absorption Spectroscopy of Organic Compounds
J.R. Dyer
Prentice-Hall

Spectroscopic Methods in Organic Chemistry
Williams and Fleming
McGraw-Hill

Organic Spectroscopy. An Introduction.
S.F. Dyke, A.J. Floyd, M. Sainsbury, R.S. Theobald
Penguin Books

Spectrometric Identification of Organic Compounds
Silverstein and Bassler
John Wiley

Applications of Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy in Organic Chemistry
L.M. Jackman
Pergamon Press

Determinación de estructuras orgánicas
Pasto y Johnson
Editorial Reverté, S.A.

Spectroscopic Problems in Organic Chemistry
Williams and Fleming
McGraw-Hill

Problemas espectrales de Química Orgánica
J.F. Dyer
Prentice-Hall International

- General: J.B. Lambert et al: *Organic Structural Analysis*, Macmillan, N.Y., 1971
- PES: A.D. Baxer: *Photoelectron Spectroscopy*, Pergamon, Oxford, 1972
J.H.D. Eland, *Photoelectron Spectroscopy*, Butterworths, London, 1974
- MS: R.A.W. Jollstone, *Mass Spectrometry for Organic Chemists*, Cambridge Univ. Press, 1972
- IR: L.J. Bellamy: *The Infrared Spectra of Complex Molecules*, 3rd Ed., Chapman and Hall, London, 1975
L.J. Bellamy: *Advances in Infrared Group Frequencies*, Chapman and Hall, London, 1975
- ¹³C RMN: E. Breitmaier: *¹³C NMR Spectroscopy*, Verlag Chemie, Weinheim, 1974
G.C. Levy, G.L. Nelson: *Carbon-13 Nuclear Magnetic Resonance for Organic Chemists*, Wiley-Interscience, N.Y., 1972. Traducció espanyola (Edicions Bellaterra, 1976).