



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BARCELONA

FACULTAD DE CIENCIAS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA ORGÁNICA

QUÍMICA ORGÁNICA ESTRUCTURAL I ESPECTROSCÓPICA II  
 Quart Curs de Químiques, Segon Semestre.  
 Curs 1976-77.

**Lliçó 1.- Introducció. Estructura, constitució, configuració, conformació. Isomeries configuracionals.**

**Lliçó 2.- Simetria molecular i quiralitat. Elements i operacions de simetria. Quiralitat. Elements quirals. Enantioisomeria i diastereoisomeria. Especificació de la quiralitat molecular: la regla seqüencial.**

**Lliçó 3.- Proquiralitat. Homotopia i heterotopia. Designació de posicions heterotòpiques. Exemples de RMN i de la bioquímica. Centres pseudoquirals. Plans heterotòpics. Helicitat i eixos quirals.**

**Lliçó 4.- Molècules quirals i activitat òptica dels compostos. Configuracions relatives i absolutes: designació i assignació. Correlacions de configuració. Formes racèmiques i racemització. Resolució de racèmics. Inducció asimètrica i regla de Cram. Principi de Curtin-Hammet.**

**Lliçó 5.- Isomeria geomètrica (Z-E). Isomeria geomètrica ciclànica. Elements diferents del carboni que presenten isomeria geomètrica. Determinació de configuracions, mètodes físics i químics.**

**Lliçó 6.- Estereoquímica conformacional, caràcter dinàmic. Factors energètics que tenen efectes sobre l'estabilitat de les conformacions. Efectes estèrics, evaluació matemàtica. Anàlisi conformacional de molècules acícliques. Reactivitat de les molècules acícliques i efectes estereoelèctrònics.**

**Lliçó 7.- Anàlisi conformacional de carbocicles hexagonals, mètodes físics. Reactivitat dels carbocicles hexagonals i efectes estereoelèctrònics. Sistemes policíclics hexagonals: reactivitat.**

**Lliçó 8.- Mètodes de determinació de configuracions absolutes. Regla de Brewster. Dicroïsmo circular, dispersió rotatòria òptica, efecte Cotton: aplicacions.**

**Lliçó 9.- Resonància Magnètica Nuclear i càcul de paràmetres cinètics. Resonància Magnètica Nuclear i aromaticitat.**

Lliçó 10.- Aplicació de mètodes espectroscòpics a la determinació d'estructures de compostos orgànics.

BIBLIOGRAFIA BASICA

I.U.P.A.C., Organic Chemistry Division, Commission on Nomenclature of Organic Chemistry, "Rules for the Nomenclature of Organic Chemistry, Section E: Stereochemistry (Recommendations 1974), Pure & Appl. Chem. 1976, 45, 11-30.

R.S. Cahn, C.K. Ingold i V. Prelog: "Specification of Molecular Chirality", Angew. Chem. Internat. Edit., 1966, 5, 385-415.

K.R. Hanson: J. Amer. Chem. Soc., 1966, 88, 2731.

H. Hirschmann i K.R. Hanson: J. Org. Chem., 1971, 36, 3293.

W.L. Alworth: "Stereochemistry and its Applications in Biochemistry", Wiley-Interscience, New York, 1972.

E.L. Eliel: "Stereochemistry of Carbon Compounds", McGraw-Hill, New York, 1962.

E.L. Eliel, N.L. Allinger, S.J. Angyal i G.A. Morrison: " Conformational Analysis", Wiley-Interscience, New York, 1967.