



UNIVERSITAT AUTÒNOMA DE BARCELONA
FACULTAT DE CIÈNCIES
DEPARTAMENT DE QUÍMICA ORGÀNICA

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BARCELONA
FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA ORGÁNICA

QUIMICA ORGANICA ESTRUCTURAL Y ESPECTROSCOPICA II

Curso 1985-86, Dr. Carlos JAIME

PROGRAMA

Tema 1. ESTEREOQUIMICA ESTATICA I.

Estructura, configuración y conformación. Geometría molecular. Elementos de simetría. Operaciones de simetría.

Tema 2. ESTEREOQUIMICA ESTATICA II.

Enantioisomería debida a un centro quiral: Centros quirales tricordinados y tetracordinados, Nomenclatura R,S.

Enantioisomería debida a más de un centro quiral: Moléculas constitucionalmente no simétricas; Moléculas constitucionalmente simétricas.

Tema 3. ESTEREOQUIMICA ESTATICA III.

Estereoisomería debida a ejes y planos quirales. Estereoisomería debida a helicidad. El concepto de protoisomería: homotopía, enantiotopía y diastereotopía.

Tema 4. ESTEREOQUIMICA DINAMICA I.

Isomería torsional en dobles enlaces: Diastereoisomería en enlaces C=C; Quiralidad torsional en enlaces C=C; Diastereoisomería en enlaces C=N y N=N.

Isomería torsional en enlaces sencillos: Aspectos termodinámicos; Rotor simple; Rotores múltiples.

Tema 5. ESTEREOQUIMICA DINAMICA II.

Estereoquímica en sistemas cíclicos: Carbociclos no sustituidos; Carbociclos monosustituidos; Carbociclos polisustituidos; Sistemas con anillos fusionados; Sistemas con anillos ponteados.

Tema 6. METODOLOGIA EN ESTEREOQUIMICA I.

Clasificación de técnicas estereoquímicas.

Espectroscopía de RMN: Desplazamientos químicos; RMN dinámica; Constantes de acoplamiento; Reactivos de desplazamiento químico, RMN de ^{13}C .

Tema 7. METODOLOGIA EN ESTEREOQUIMICA II.

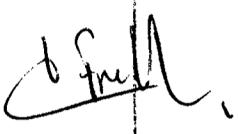
Análisis conformacional teórico: Métodos, Presentación de resultados. Mecánica Molecular. Métodos Químico-Quánticos.

Tema 8. METODOLOGIA EN ESTEREOQUIMICA III.

Métodos ópticos: Dispersión Rotatoria Optica; Dicroismo Circular; Efecto Cotton y regla del octante; Otros métodos ópticos.

BIBLIOGRAFIA

- Elementary Organic Stereochemistry and Conformational Analysis, B.A. Marples, The Royal Society of Chemistry, London, 1981.
- Stereochemistry: Basic Concepts and Applications, N. Nográdi, Pergamon Press, Budapest, 1981.
- Principles of Organic Stereochemistry, B. Testa, Marcel Dekker Inc., New York, 1979.
- Stereochemistry and Conformational Analysis, J. Dale, Verlag Chemie, New York, 1978.
- Stereochemistry and its Applications in Biochemistry, W.A. Alworth, John Wiley and Sons Inc., New York, 1972. Versión castellana: Editorial Alhambra, 1980.
- Introduction to Stereochemistry, K. Mislow, W.A. Benjamin Inc., New York, 1966.
- Conformational Analysis, E.L. Eliel, N.L. Allinger, S.J. Angyal y G.A. Morrison, John Wiley and Sons Inc., New York, 1965.
- Stereochemistry of Carbon Compounds, E.L. Eliel, McGraw-Hill Book Company Inc., New York, 1962.
- Molecular Mechanics, U. Burkert y N.L. Allinger, ACS Monograph 177, Washington D.C., 1982.
- A Handbook of Computational Chemistry, T. Clark, John Wiley and Sons, 1984.
- R.S. Cahn, C.K. Ingold y V. Prelog, "Specification of Molecular Chirality", Angew.Chem.Int.Ed.(Engl.), 1966, 5, 385-415.

Professor: Dr. Carles JAIME
Curs: 4^{rt} Químiques
Vist i Plau: p.o. 
Signat: S. Moreno
Data: 31-01-86