

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE FARMACIA



PROGRAMA DE

ELUCIDACIÓN ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS ORGÁNICOS

1,5 Créditos Teóricos

3 Créditos Prácticos

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA ORGÁNICA Y FARMACEÚTICA

PLAN DE ESTUDIOS 2000

BIBLIOGRAFÍA

- * M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh, *Métodos espectroscópicos en Química Orgánica*. Ed. Síntesis, 1997.
- * E. Pretsch, T. Clerc, J. Seibl, W. Simon, "Tablas para la elucidación estructural de compuestos orgánicos por métodos espectroscópicos", Springer Ed., 1998.
- * L.D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman "Organic Structures from Spectra", 20 Ed., John Wiley & Sons, 1995.
- D.H. Williams, I. Fleming "Spectroscopic Methods in Organic Chemistry" 50 Ed. McGraw-Hill, 1995.
- H. Friebolin "Basic one- and two dimensional NMR-spectroscopy" VCH, Weinheim, 1991.
- J.K.M. Sanders, B.K. Hunter "Modern NMR Spectroscopy" Oxford University Press, 1993.
- E. Breitmaier "Structure elucidation by NMR in organic Chemistry" J. Wiley, Chichester, 1993.
- D. Whittaker, *Interpreting Organic Spectra*, Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2000.
- P. Crews, J. Rodríguez, M. Jaspars, *Organic Structure Analysis*, Oxford University Press, Nueva York, 1998.

PROGRAMA DE PRÁCTICAS

En esta asignatura toda la carga práctica se centrará en seminarios donde se resolverán espectros de la bibliografía: IR, UV, ¹H-NMR, ¹³C-NMR y E.M.

PROGRAMA DE ELUCIDACIÓN ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS ORGÁNICOS

OPTATIVA - PRIMER CICLO - PLAN 2000

1,5 Créditos Teóricos

3 Créditos Prácticos (problemas)

OBJETIVOS GENERALES

Se pretende dar al alumno la formación básica para la interpretación de espectros y lograr así la elucidación estructural de sustancias sencillas de origen sintético o natural por combinación de las diversas técnicas.

CRITERIOS DE VALORACIÓN

La evaluación del grado de formación adquirido por el alumno se realizará mediante un examen final, así como por cualquier otra prueba que los profesores estimen oportuno llevar a cabo. Esta prueba comprenderá la evaluación de los créditos teóricos y prácticos.

PROGRAMA

TEMA 1.- Introducción a la determinación estructural. Contribución de las diferentes técnicas espectroscópicas al análisis estructural orgánico. Principios generales de la espectroscopía de absorción, cromóforos, conectividad, sensibilidad. Consideraciones prácticas.

TEMA 2.- Aplicación de la espectroscopía ultravioleta/visible a la determinación estructural. Reglas de selección. Cromóforos. Efectos de

los disolventes. Olefinas y polienos. Dienos conjugados. Aldehídos y cetonas. Transiciones $\pi-\pi^*$ y $n-\pi^*$. Ácidos $\alpha-\beta$ no saturados, ésteres, nitrilos y amidas. El anillo bencénico. Hidrocarburos aromáticos policíclicos. Compuestos heterocíclicos. Aplicaciones de la espectroscopía UV/Vis.

TEMA 3.- Aplicación de la espectroscopía Infrarroja y Raman a la determinación de estructuras orgánicas. Absorciones IR características de diferentes grupos funcionales. Espectroscopía Raman. Aplicaciones de la espectroscopía Raman.

TEMA 4.- Aplicación de la espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN) a la determinación de estructuras orgánicas. El desplazamiento químico y factores que lo condicionan. Acoplamiento espín-espín. Intensidad. Espectroscopía de resonancia magnética nuclear protónica (^1H): Desplazamientos y acoplamientos $^1\text{H}-^1\text{H}$. Constantes de acoplamiento. Acoplamientos con otros núcleos. Métodos especiales. Espectroscopía de resonancia magnética nuclear de carbono (^{13}C). Desplazamientos químicos y acoplamientos más significativos. Sistemas de incrementos para la estimación de desplazamientos químicos de ^{13}C . Métodos especiales. Espectroscopía de resonancia magnética nuclear de otros núcleos ^{19}F , ^{31}P , ^{15}N .

TEMA 5.- Aplicación de la espectrometría de masas a la determinación estructural. Ión molecular e isótopos. Principales fragmentaciones de los compuestos orgánicos. Reacciones térmicas en el espectrómetro de masas. Marcaje isotópico. Otros métodos de ionización.

TEMA 6.- Aplicación conjunta de las técnicas espectroscópicas en el análisis estructural orgánico.