



UNIVERSITAT AUTÒNOMA DE BARCELONA
DEPARTAMENT DE QUÍMICA
QUÍMICA ORGÀNICA

QUÍMICA ORGÀNICA HETEROCICLICA

Dr. Jordi Marquet

5^a Curs de Ciències Químiques.

Programa.

- Lliçó 1.- Introducció. Criteris d'aromaticitat: criteri estructural, mecanístic, termodinàmic, espectroscòpic i geomètric. Heterocicles aromàtics i no aromàtics. Tipus estructurals més comuns. Principis bàsics de reactivitat dels heterocicles aromàtics. Nomenclatura d'heterocicles.
- Lliçó 2.- Síntesi d'heterocicles. Introducció. Reaccions de ciclació. Substitució sobre carboni saturat. Addició nucleòfila intramolecular sobre grups carbonil i dobles enllaços. Ciclació sobre triples enllaços. Ciclacions radicaliques. Ciclacions de carbens i nitrens. Reaccions electrocícliques. Reaccions de cicloaddició. Cicloaddicions 1,3-dipolars. Reaccions hetero-Diels-Alder. Cicloaddicions (2+2). Reaccions quelotròpiques. Reaccions "ene".
- Lliçó 3.- Heterocicles aromàtics de cinc àtoms amb un heteroàtom. Heterocicles simples: furàn, pirrole i tiofè. Propietats físiques i estructures. Reactivitat general. Reaccions sobre l'anell. Reaccions dels substituents. Mètodes sintètics. Exemples d'interès, porfirines. Benzoderivats: benzofuràn, indole i benzotiofè. Reaccions i mètodes sintètics. Exemples d'interès.
- Lliçó 4.- Heterocicles aromàtics de sis àtoms amb un heteroàtom. Piridina. Propietats físiques i estructura. Reaccions. Derivats de la piridina, N-òxid de piridina. Mètodes sintètics. Exemples d'interès. Sals de pirili i pirones. Benzoderivats de la piridina: quinolina, isoquinolina, acridina i fenantridina. Reaccions i mètodes sintètics. Derivats d'interès. Sals de benzopirili i benzopirones.
- Lliçó 5.- Heterocicles aromàtics amb cinc i sis àtoms amb més d'un heteroàtom. Pirazole i imidazole. Propietats, reaccions i mètodes sintètics. Altres heterocicles aromàtics de cinc àtoms amb dos heteroàtoms: oxazole, isoxazole, tiazole i isotiazole. Exemples d'interès. Pirimidina. Propietats, reaccions, mètodes sintètics i derivats. Altres heterocicles de sis àtoms amb més d'un heteroàtom: piridazina, pirazina, purina. Reactivitat i mètodes sintètics. Bases púriques i pirimidíniques.
- Lliçó 6.- Heterocicles no aromàtics I. Introducció. Tensió d'anell. Barreres de torsió. Influència de les distàncies d'enllaç i del radi de van der Waals: preferències conformacionals en heterocicles flexibles. Altres tipus d'interaccions en heterocicles saturats, l'efecte anomeric.

Lliçó 7.- Heterocicles no aromàtics II. Estudi de les propietats i mètode sintètics d'alguns exemples d'especial interès: aziridines; oxirans; acetidines; acetidinones (penicil·lines i cefalosporines), anells de cinc i sis àtoms amb un o més heteroàtoms, total o parcialment saturats; azepines i diazepines, interès farmacològic.

Bibliografia: Heterocyclic Chemistry, J.A. Joule, G.F. Smith, Ed. Van Nostrand Reinhold, 2ª Edició 1978.

Heterocyclic Chemistry, T.L. Gilchrist, Ed. Pitman 1985.

Contemporary Heterocyclic Chemistry, G.R. Newkome, W.W. Paudler, Ed. J. Wiley and Sons, 1982.

An Introduction to the Chemistry of Heterocyclic Compounds, R.M. Acheson, Ed. Interscience Publishers. 3ª Edició 1976.