

ESTEREOQUÍMICA I MECANISMES DE REACCIÓ

- 1.- LA REACCIÓ QUÍMICA. RELACIÓ ENTRE ESTRUCTURA I REACTIVITAT. Dades termodinàmiques i dades cinètiques. La coordenada de reacció. L'estat de transició. Principi de reversibilitat microscòpica. Postulat de Hammond. Principi de reactivitat-selectivitat. Factors estèrics, electrònics i estereoelectrònics. El dissolvent.
- 2.- ESTEREOQUÍMICA ESTATICA. RELACIÓ ENTRE CONFIGURACIÓ I REACTIVITAT. Simetria molecular, enantioisomeria i diastereoisomeria. Designacions configuracionals, els sistemes D,L i R,S. Diferenciació entre molècules disimètriques, creació de relacions diastereomèriques. Estereoespecificitat biològica. Proquiralitat. Diferenciació bioquímica entre grups enantiotòpics i diastereotòpics. Grups trigonals proquirals.
- 3.- ESTEREOQUÍMICA DINÀMICA. RELACIÓ ENTRE CONFORMACIÓ I REACTIVITAT. Flexibilitat molecular i interaccions febles: molècules acícliques i cícliques. Dependència de la reactivitat amb la conformació. Exemples en sistemes cíclics i acíclics. Principi de Curtin-Hammett. Inducció asimètrica.
- 4.- CATALISIS HOMÒGENEA. Catàlisis àcida i bàsica. Catàlisi nucleòfila. Catàlisi electròfila. Relació mecanística amb la catàlisi enzimàtica.
- 5.- PROPIETATS FONAMENTALS DELS COMPOSTOS HETEROAROMÀTICS. Aromaticitat. Heterocicles de sis membres amb un heteroàtom. Heterocicles de sis membres amb més d'un heteroàtom. Heterocicles de cinc membres amb un i dos heteroàtoms. Bases constituents dels àcids nucleics. Descripció mecanística de l'acció catalítica de la tiamina y del piridoxal.
- 6.- RADICALS. Aspectes generals de la química de radicals. Processos en cadena. Autooxidació. Visió mecanística de l'acció de la vitamina B₁₂.
- 7.- LA QUÍMICA DELS ESTATS EXCITATS. FOTOQUÍMICA. Aspectes fonamentals. Processos representatius. Transferència energètica i transferència electrònica. Fotoreduccions i fotooxidacions. Visió mecanística de la fotosíntesi.

Bibliografia:

- "Estereoquímica y su Aplicación en Bioquímica". W.L. Alworth. Editorial Alhambra.
- "Physical Organic Chemistry". N.S. Isaacs. Longman ed.
- "Primary Metabolism: A Mechanistic Approach". J. Staunton. Oxford University Press.