

Síntesi orgànica avançada

Codi 20609

2n semestre

Professor: R. M. Ortuño

Requisits: Química orgànica I (aprovada), Química orgànica II (aprovada), Mètodes sintètics (aprovada)

- Plantejament de Síntesis orgàniques.
Introducció. Conceptes generals. Conversió, selectivitat i rendiment. Síntesis totals i síntesis parcials.
- Metodologia en l'elaboració d'un pla de síntesi.
Retrosíntesi. Concepte de sintó, precursor i intermedi. Anàlisi estructural i generació de precursors. Arbre de síntesi.
- Consideració dels grups funcionals.
Compostos difuncionals. Concepte de dissonància. Inversió de reactivitat: processos més freqüents. Interconversió i manipulació de grups funcionals. Quimioselectivitat.
- Protecció de grups funcionals.
Introducció general. Característiques d'un grup protector. Protecció d'alcohols: èters, esters. Protecció de diols. Protecció del grup carbonil: acetals, ditioacetals. Protecció del grup carboxil: esters. Protecció d'amines: carbamats.
- Consideració de l'esquelet carbonat.
Cadenes, anells i apèndixs. Compostos cíclics. Compostos aromàtics: principis bàsics.
- Síntesi d'heterocicles I.
Consideracions generals. Reaccions de ciclació intramolecular: ciclacions nucleòfil-electròfil i ciclacions radicalàries.
- Síntesi d'heterocicles II.
Reaccions electrocícliques intramoleculars i intermoleculars: ciclacions dipolars, reaccions hetero-Diels-Alder i ciclacions [2+2].
- Introducció a la síntesi asimètrica.
Puresa òptica i excés enantiomèric. Resolució de racèmics: mètodes clàssics i mètodes quimioenzimàtics. Concepte d'inducció asimètrica. Precursors, auxiliars i catalitzadors quirals. Exemples.

- **Gasos reals.**
Desviament del comportament ideal. Equació de van der Waals. Equació d'estat del virial a partir del Col·lectiu macrocanònic. Coeficients del virial en el límit clàssic. Aproximació dels potencials de par. Segon coeficielt del virial.
- **Cristalls.**
Introducció. Tipus de cristalls. Energia de cohesió d'un cristall. Constant de Madelung. Capacitat calorífica dels sòlids. Espectre vibracional d'un cristall monoatòmic. Model d'Einstein. Model de Debye. Comparació amb els valors experimentals.
- **Estat líquid.**
Estructura dels líquids. Teoria de les funcions de distribució. Funcions de correlació. Funció de distribució radial. Expressió de l'energia i de al pressió en termes de la funció de distrigució radia. Funció de distribució radial a densitat baixa. Potencial de força mitjana.
- **Mètodes de simulació en líquids.**
Mètodes de simulació. Expansió de l'energia en sèrie de n-cossos. Potencial de par i correlacions de n-cossos. condicions periòdiques de contorn. Truncament de les interaccions. Mètode de Monte-Carlo. Algorisme de Metròpolis. Cadenes de Markov. Anàlisi de resultats. Dinàmica Molecular.