



Universitat Autònoma de
Barcelona

Departament de Química
Unitat de Química Orgànica

MECANISMES DE REACCIÓ. Curs 2004-2005

Professors (teoria/problemes)	Localització	Tutories
Marta Figueredo / Félix Busqué	C7-439 C7-409	A determinar
Roser Pleixats / Rosa M ^a Ortuño	C7-431 C7-443	A determinar

Lliçó 1.- ASPECTES ENERGÈTICS DE LA REACCIÓ QUÍMICA

Dades termodinàmiques. Dades cinètiques. Teoria de l'estat de transició. Paràmetres d'activació. Postulat de Hammond. Control cinètic i control termodinàmic. Principi de Curtin-Hammett.

Lliçó 2.- FACTORS QUE GOVERNEN LA REACTIVITAT ($\Delta G^\ddagger$)

Efecte cinètic d'isòtop. Efectes cinètics electrònics: equació de Hammett. Efectes cinètics estèrics. Efectes cinètics dels dissolvent. Escales de polaritat.

Lliçó 3.- MÈTODES NO CINÈTICS EN L'ESTUDI DE MECANISMES DE REACCIÓ

Anàlisi de productes. Marcatge isotòpic. Encreuament. Estereoquímica. Catàlisi. Intermedis de reacció.

Lliçó 4.- REACCIONS POLARS

Substitució nucleòfila sobre carboni saturat. Parells iònics. Transposicions sobre centres catiónics. Addició electròfila a enllaços múltiples. Substitució aromàtica electròfila. Reaccions dels compostos carbonílics. Substitució aromàtica nucleòfila. Reacció d'eliminació.

Lliçó 5.- REACCIONS RADICALÀRIES

Detecció de radicals lliures. Reaccions homolítiques. Reaccions en cadena. Iniciadors radicalaris. Reaccions radicalàries característiques. Processos de transferència electrònica.

Lliçó 6.- REACCIONS PERICÍCLIQUES

Orbitals frontera. Teoria de les perturbacions en la reactivitat. L'equació de Klopman-Salem. Cicloaddicions, reaccions electrocícliques i transposicions sigmatròpiques. Interacció d'orbitals frontera. Regles de selecció generalitzades de Woodward-Hoffman. La reacció de Diels-Alder.

Lliçó 7.- REACCIONS FOTOQUÍMIQUES

Formació d'estats excitats. Tipus d'estats excitats, estats triplets, rendiment quàntic, transferència d'energia, desactivació i fotosensibilització. Reaccions dels estats excitats.

BIBLIOGRAFIA

- 1.- F.A. Carey, R.J. Sundberg, "Advanced Organic Chemistry, Part A, Structure and Mechanisms", 4^a Edició, Plenum Press, New York, 2000.
- 2.- J. March, "Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure", 4^a Ed., Wiley, New York, 1992.
- 3.- C.D. Johnson, "The Hammett Equation", Cambridge University Press, 1973.
- 4.- I. Fleming, "Frontier Orbitals and Organic Chemical Reactions", Wiley, London, 1976.