



Química Orgànica I

1. Introducció a la Química Orgànica

Introducció a l'enllaç. Enllaços del carboni: senzills i múltiples. Estabilitat cinètica i termodinàmica de les cadenes carbonades. Classificació dels compostos orgànics: grups funcionals. Nomenclatura. Isomeria constitucional. Estructures de Lewis.

2. Les Reaccions Orgàniques

Classificació: substitucions, addicions, eliminacions, transposicions. Processos homolítics i heterolítics. Reaccions elementals i reaccions per etapes. Termodinàmica i equilibri. Cinètica i mecanisme. Coordenada i perfil de reacció. Estats de transició i intermedis de reacció. Processos polars; electròfils i nucleòfils.

3. Alcans

Fonts d'alcans: petroli i gas natural. Classes d'alcans; sèries homòlogues. Propietats físiques. Conformacions de l'età i del *n*-butà. Cicloalcans: tensió anular. Conformacions del ciclohexà. Isomeria *cis-trans* ciclànica. Halogenació i combustió d'alcans; radicals lliures; energies de dissociació d'enllaç i estabilitat.

4. Isomeria Òptica

Activitat òptica; poder rotatori. Quiralitat molecular; el centre quiral. Configuració: la seva especificació i representació. Enantiòmers. Racèmics. Diastereoisòmers. Formes *meso*. Resolució de racèmics. Constitució, configuració i conformació.

5. Derivats Halogenats i Compostos Organometal·lics

Halurs d'alquil: estructura, propietats i obtencions. Substitució nucleòfila sobre carboni saturat: cinètica i mecanisme. Reaccions S_N1 i S_N2 : efectes electrònics, estèrics i del grup sortint. Estereoquímica: inversió i racemització. Reaccions competitives: eliminacions $E1$ i $E2$. Derivats polihalogenats. Compostos organometal·lics; reactius de Grignard i reactius organolítics: propietats i preparació.

6. Alquens

Estructura electrònica. Isomeria *E-Z*. Fonts d'alquens: *cracking* d'alcans. Propietats físiques. Hidrogenació catalítica; estabilitat i calors d'hidrogenació. Reaccions d'addició (d'aigua, d'halurs d'hidrogen, d'halògens); intermedis catiónics; regla de Markovnikov; addició *trans*. Reaccions radicalaries; halogenació al·lítica. Preparació d'alquens: reaccions d'eliminació (d'aigua i d'halurs d'hidrogen); regla de Saytzeff. Clorur de vinil; polimerització d'olefines.

7. Alquins

Estructura electrònica. Acidesa dels acetilens terminals; etinilació. Reaccions d'addició sobre el triple enllaç: addicions iniciades per electròfils. Hidrogenació d'alquins. Preparació d'alquins.

8. Diens i Poliens

Al·lens: estructura electrònica. Butadiè: estructura electrònica. Addicions 1,2 i 1,4 al butadiè; control cinètic i termodinàmic

9. Alcohols i Èters

Estructura i propietats dels alcohols: acidesa i associació molecular. Reaccions d'obtenció (hidratació d'alquens, reducció de compostos carbonílics, reacció de Grignard). Conversió d'alcohols en derivats halogenats. Oxidació d'alcohols. Alcohols al·lílics, glicols i poliols. Èters: propietats físiques i químiques. Síntesi de Williamson. Èters cíclics: epòxids; preparacions des de clorohidrines i per epoxidació. Tiols i tioèters.

Bibliografia:

- ◆ T.W.G. Solomons. *Organic Chemistry* (6ª Ed.), John Wiley and Sons, New York, 1996.
- ◆ P.Y. Bruice. *Organic Chemistry*, Prentice-Hall Internacional, 1998.
- ◆ K.P.C. Vollhardt, N.E. Schore. *Organic Chemistry* (2ª Ed.), W.H. Freeman and Co., New York, 1996.
- ◆ S.N. Ege. *Química Orgànica* (3ª Ed.), Reverté, Barcelona, 1997.
- ◆ A. Streitwieser Jr., C.H. Heathcock, E.M. Kosower. *Introduction to Organic Chemistry* (4ª Ed.), McMillan Publishing Co., Inc. New York, 1992.
- ◆ *Nomenclatura de Química Orgànica. Seccions A,B i C. Regles definitives*, Institut d'Estudis Catalans, Barcelona, 1989.
- ◆ W.R. Peterson, *Formulación y Nomenclatura en Química Orgánica*, EUNIBAR, 1987.

Consultes al Professor: Horari a convenir.