

25401 Química Orgànica

1. Introducció a la Química Orgànica

Justificació de la Química Orgànica. Introducció a l'enllaç. L'enllaç covalent: estructures de Lewis, ressonància, geometria molecular, orbitals moleculars, hibridacions, electronegativitat. Enllaços del carboni: senzills i múltiples. Estabilitat cinètica i termodinàmica de les cadenes carbonades. Estructures i fórmules de les molècules orgàniques. Propietats físiques i estructura molecular.

2. Compostos Orgànics

Classificació dels compostos orgànics: grups funcionals; grau d'oxidació. Hidrocarburs: alcans, alquens, alquins i hidrocarburs aromàtics. Compostos orgànics de primer grau d'oxidació: halurs orgànics, alcohols, fenols, èters, tiols i amines; nomenclatura, estructura i propietats físiques.

3. Anàlisi conformacional i estereoquímica

Isomeria estructural o constitucional. Isòmers conformacionals. Anàlisi conformacional de l'età i del *n*-butà. Cicloalcans: tensió anular. Anàlisi conformacional del ciclohexà. Isomeria *cis-trans* ciclànica. Isomeria *Z-E* dels alquens. Estereoisòmers: enantiòmers i diastereòmers. Quiralitat i les seves condicions. Activitat òptica. Configuració: representació i nomenclatura. Mescles racèmiques. Compostos amb més d'un centre asimètric: formes *meso*. Constitució, configuració i conformació. Compostos quirals i la seva importància en els éssers vius.

4. Reaccions orgàniques

Introducció a les reaccions orgàniques. Intermedis de reacció. Classificació de les reaccions orgàniques: reaccions d'addició, substitució i eliminació.

5. Addició electròfila a enllaços múltiples

Reaccions d'addició al doble enllaç carboni-carboni. Addició d'halurs d'hidrogen; intermedis catiònics, regla de Markovnikoff. Addició d'aigua: hidratació catalitzada per àcids. Addició d'halogens: mecanisme i estereoquímica. Addició d'hidrogen; calors d'hidrogenació i estabilitat. Oxidació d'alquens: *cis*-dihidroxilació.

6. Substitució nucleòfila a carboni saturat

Substitució nucleòfila a un carboni saturat. Mecanismes de la substitució. Reaccions de S_N1 i S_N2 : estereoquímica: inversió i racemització. Factors que afecten a les reaccions de substitució nucleòfila. Aplicacions sintètiques. Alcohols i compostos relacionats amb enllaç C-O. Tiols i compostos relacionats. Amines i compostos C-N.

7. Reaccions d'eliminació

Reaccions d'eliminació E1 i E2: cinètica i mecanismes. Regioquímica de l'eliminació; regla de Saytzeff. Formació de dobles enllaços C-O.

8. Addició nucleòfila a grup carbonil

Compostos orgànics de segon grau d'oxidació: aldehids i cetones. Reactivitat del grup carbonil: mecanismes d'addició. Addició alcohols: acetals i cetals. Addició d'amoniac i derivats. Addició de cianur d'hidrogen. Addició d'hidrur. Addició d'enolats: condensació aldòlica.

9. Substitució nucleòfila a grups carbonil i relacionats

Compostos orgànics de tercer grau d'oxidació: àcids carboxílics i derivats (halurs d'àcid, esters-lactones, anhídrids, amides-lactames). Substitució nucleòfila al grup carbonil: mecanisme d'addició-eliminació. Àcids carboxílics i derivats: halurs d'àcid, anhídrids, esters i amides. Reaccions d'interconversió. Addició d'hidrur. Substitució per enolats: condensació de Claisen

10. Substitució electròfila aromàtica

Aromaticitat. Reaccions de substitució electròfila aromàtica. Mecanisme. Reacció d'halogenació, nitració i sulfonació. Reaccions d'alquilació i acilació de Friedel-Crafts. Compostos heterocíclics aromàtics.

11. Enzims

Aminoàcids: estructura i propietats. Pèptids i proteïnes. Els enzims com a catalitzadors. Nomenclatura i classificació dels enzims. Cofactors enzimàtics. Lisozima: exemple concret de catàlisi enzimàtica. Inhibició enzimàtica. Control de l'activitat enzimàtica.

Bibliografia:

- ◆ H. Hart, D. Hart, L.E. Craine, *Química Orgànica* (9ª Ed.), McGraw Hill, 1995. ISBN 970-10-0610-0.
- ◆ G.H. Schmid. *Química Biológica*. Ed. Interamericana.1986. ISBN 84-7605-350-9.
- ◆ T.W.G. Solomons. *Organic Chemistry* (6ª Ed.), John Wiley and Sons, New York, 1996. ISBN 0-471-01342-0.
- ◆ P.Y. Bruice. *Organic Chemistry*, Prentice-Hall International,1998. ISBN 0-13-841925-6.
- ◆ K.P.C. Vollhardt, N.E. Schore. *Organic Chemistry* (2ª Ed.), Freeman, New York, 1994. ISBN 0-7167-2010-8.
- ◆ S.N. Ege. *Química Orgànica* (3ª Ed.), Reverté, Barcelona, 1997. ISBN 84-291-7065-0.

HORARI DE CONSULTES: a convenir