

ASSIGNATURA: Química Orgánica

Codi: 24658

Tipus Assign.: Tr/Ob/Opt	Troncal	Curs:	2006-2007	Quad.: Segon
Crèdits Totals:	6	Teor.:	4.5	Prob.: 1.5

Departament: Química

Curs acadèmic: 2006/2007

Professors: Rosa M^a Sebastián Pérez

e-mail: rosamaria.sebastian@uab.es

Objectius de l'assignatura:

Conèixer l'estructura i la reactivitat dels grups funcionals orgànics més comuns. Interconversió de grups funcionals. Capacitat de relacionar els efectes estereoelectrònics amb l'estructura i reactivitat de les molècules orgàniques. Conèixer el llenguatge de la Química Orgànica. Reconèixer la importància de la Química Orgànica dintre de la societat industrial.

Assignatures que es recomana haver cursat prèviament

26053 Fonaments de Química

26051 Físico-Química

Programa:

1. Conceptes bàsics

Tipus de enllaç. Estructures de Lewis. Ressonància. Polaritat d'enllaç (moment dipolar). Hibridació. Enllaços de carboni senzills i múltiples. Forces intermoleculars. Termodinàmica i equilibri: nocions bàsiques. Cinètica i mecanisme: reaccions elementals i reaccions per etapes; velocitat de reacció; coordenada i perfil de reacció; estat de transició i intermedis de reacció; catàlisi.

2. Introducció a la Química Orgànica

La química orgànica del nostre entorn. Estabilitat cinètica i termodinàmica de les cadenes carbonades. Classificació dels compostos orgànics: grups funcionals, grau d'oxidació. Nomenclatura. Estructures i fórmules de les molècules orgàniques. Isomeria estructural o constitucional. Conceptes de nucleòfil i electròfil. Processos homolítics i heterolítics. Classificació de les reaccions orgàniques més comuns.

3. Alcans

Classes d'alcans: sèries homòlogues. Nomenclatura. Propietats físiques. Fonts d'alcans: petroli i gas natural. Conformacions de l'età i del *n*-butà (Projeccions de Newman). Cicloalcans; tensió anular. Conformacions del ciclohexà. Isomeria *cis-trans* ciclànica. Combustió i halogenació d'alcans; radicals lliures (estabilitat relativa), reaccions en cadena. Reactivitat i selectivitat dels diferents halògens.

4. Alquens i alquins

Estructura electrònica dels alquens. Nomenclatura. Isomeria geomètrica *cis-trans* (*Z/E*). Propietats físiques. Fonts d'alquens: *cracking* de naftes. Hidrogenació catalítica; estabilitat i calors d'hidrogenació. Reaccions d'addició (d'aigua, d'halurs d'hidrogen i d'halogens), intermedis catiónics, regla de Markovnikov. Isomerització d'alquens. Polimerització d'olefines. Reaccions d'oxidació. Preparació d'alquens mitjançant reaccions d'eliminació (Regla de Saytzeff). Oxidacions. Classificació dels poliens. Estructura electrònica d'alquins. Nomenclatura. Propietats físiques (acidesa). Preparació d'alquins (acetilè). Reactivitat.

5.- Isomeria òptica

Estereoisòmers. Quiralitat molecular: centre estereogènic o quiral. Activitat òptica i poder rotatori. Mescles racèmiques. Excès enantiomèric i puresa òptica. Configuració: especificació i representació (Projeccions de Fischer, *R/S*). Diastereoisòmers: formes *meso*.

6. Derivats halogenats

Halurs d'alquil: estructura, nomenclatura i propietats. Preparació. Reaccions de substitució nucleòfila sobre carboni saturat: mecanismes (S_N1 i S_N2) i estereoquímica. Reaccions d'eliminació. Compostos halogenats d'interès industrial: CFC, clorur de vinil i clorur de polivinil (PVC) i altres derivats polihalogenats.

7. Alcohols, èters, tiols i tioèters.

Estructura electrònica i nomenclatura. Propietats: acidesa i associació molecular. Preparació i deshidratació d'alcohols. Conversió en derivats halogenats. Oxidació d'alcohols. Poliols. Èters: estructura, nomenclatura i propietats físiques. Síntesi de Williamson. Èters cíclics: epòxids i òxid d'etilè. Tiols i tioèters: estructura, nomenclatura i propietats físiques.

8. Amines

Estructura electrònica i basicitat. Nomenclatura. Reactivitat. Sals d'amoni.

9. Aldehids i cetones

Estructura i reactivitat del grup carbonil. Oxidació i reducció del grup carbonil. Reaccions d'addició nucleòfila: de cianur d'hidrogen (cianohidrines), de derivats de nitrogen (imines, oximes, hidrazones), d'alcohols (hemiacetals i acetals -Carbohidrats: classificació i nomenclatura-). Enolitització i tautomeria cetoenòlica. Reacció sobre el carboni α : condensació aldòlica.

10. Àcids carboxílics i derivats

Estructura electrònica i caràcter àcid. Propietats físiques: associació molecular. Obtenció d'àcids carboxílics: oxidacions d'altres compostos orgànics, hidròlisi de nitrils. Esterificació. Derivats d'àcids carboxílics: halurs d'àcid, anhídrids, èsters, amides; reaccions d'interconversió. Fibres sintètiques. Lípids i grases naturals; saponificació. Aminoàcids: enllaç peptídic, formes betaíniques i punt isoelèctric.

11. Compostos aromàtics

El benzè: estructura electrònica. Ressonància. Aromaticitat. Fonts d'hidrocarburs aromàtics: *reforming* de naftes. Reaccions de substitució electròfila aromàtica (S_EAr): nitració, sulfonació, halogenació, alquilació de Friedel-Crafts i acilació de Friedel-Crafts. Efectes dels substituents en les S_EAr : reactivitat i orientació. Fenols. Alguns compostos aromàtics d'interès industrial: detergents, colorants i pesticides.

Sistema d'avaluació:

Posible treball continuat en grup al llarg del curs a través d'una interfície virtual (*Wiki*): resums de tema, exercicis i tutories grupals (màx. 15% de la nota). Examen final amb continguts fonamentalment pràctics (min. 85% de la nota). El treball en *wiki* només tindrà validesa per la

primera convocatòria de juny, sempre i quan es superi l'examen amb una puntuació mínima de 4 sobre 10; la nota al setembre serà només el resultat de l'examen corresponent.
Pàgina inicial de l'espai virtual: <https://wiki.uab.es/>

Bibliografia:

- ◆ T.W.G. Solomons. *Organic Chemistry* (8^a Ed.), John Wiley and Sons, New York, 2004.
- ◆ K.P.C. Vollhardt; N.E. Schore *Química Orgánica. Estructura y Función* (3^a Ed.), Omega, 2000.
- ◆ P.Y. Bruice. *Organic Chemistry* (3^a Ed) Prentice-Hall International, 2001.
- ◆ S.N. Ege. *Química Orgánica* (3^a Ed.), reverté, Barcelona, 1997.
- ◆ W.R. Peterson. *Formulación y nomenclatura en Química Orgánica*, EUNIBAR, 1987.
- ◆ E. Quiñoá: R. Riguera *Nomenclatura y Representación de los Compuestos Orgánicos*, McGraw-Hill, 1996.