



Química Orgànica I

1. Introducció a la Química Orgànica

Estructures de Lewis. Estructures ressonants. Electròfils i nucleòfils. Enllaços del carboni: senzills i múltiples. Estabilitat cinètica i termodinàmica de les cadenes carbonades. Processos homolítics i heterolítics. Classificació dels compostos orgànics: grups funcionals. Nomenclatura. Termodinàmica i equilibri. Cinètica i mecanisme. Coordenada i perfil de reacció. Estats de transició i intermedis de reacció.

2. Alcans

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

3. Isomeria òptica

Activitat òptica. Quiralitat. El centre estereogènic. Configuració absoluta: la seva especificació i representació. Enantiòmers. Racèmics. Diastereoisòmers. Formes *meso*. Resolució de racèmics.

4. Derivats halogenats i compostos organometàl·lics

Halurs d'alquil: estructura, propietats i obtencions. Derivats polihalogenats. 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. Tosilats i mesilats. Compostos organometàl·lics: reactius de Grignard: propietats i preparació.

5. 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 i formació d'halohidrines). Intermedis catiònics. Regla de Markovnikov. Halogenació al·lílica. Preparació d'alquens: reaccions d'eliminació (d'aigua i d'halurs d'hidrogen); regla de Saytzeff. Addicions anti-Markovnikov. Oxidacions amb permanganat. Isomerització *cis-trans*. Clorur de vinil; polimerització d'olefines.

6. Alquins

Estructura electrònica. Acidesa dels acetilens terminals. Valors de pK_a d'alcans, alquens i alquins. Etiliació. Reaccions d'addició al triple enllaç: addicions iniciades per electròfils. Hidrogenació d'alquins. Preparació d'alquins.

7. Diens, poliens i benzè

Al·lens: estructura electrònica. Butadiè: estructura electrònica. Addicions 1,2 i 1,4 al butadiè; control cinètic i termodinàmic. Benzè: característiques estructurals, ressonància i orbitals moleculars. Criteris d'aromaticitat. Calor d'hidrogenació.

8. Alcohols i èters

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

Bibliografia:

- ◆ T. W. G. Solomons. *Organic Chemistry* (8a Ed.), John Wiley and Sons, New York, 2004.
- ◆ P. Y. Bruice. *Organic Chemistry*, Prentice-Hall Internacional, 1998.
- ◆ K. P. C. Vollhardt, N. E. Schore. *Organic Chemistry. Structure and Function* (4a Ed.), W. H. Freeman and Co., New York, 2000.
- ◆ 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 Orgànica*, EUNIBAR, 1987.

Consultes al Professor: Horari a convenir.

Avaluació: Examen final