



Programa de Química Orgànica Curs 2006-2007

1. Introducció i Conceptes bàsics

La química orgànica. Estructura Atòmica. Tipus de enllaç. Estructures de Lewis. Hibridació. Enllaços de carboni senzills i múltiples. Ressonància. Polaritat d'enllaç (moment dipolar) Forces intermoleculars. Termodinàmica i equilibri: nocions bàsiques. Cinètica i mecanismes de reacció: reaccions elementals i reaccions per etapes; velocitat de reacció; coordenada i perfil de reacció; estat de transició i intermedis de reacció; catàlisi. Nomenclatura. Estructures i fórmules de les molècules orgàniques. Isomeria estructural o constitucional. Grau d'oxidació, Classificació dels compostos orgànics: grups funcionals.

2.- Estereoquímica

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*.

3. Alcans

Classes d'alcans: sèries homòlogues. Nomenclatura. Propietats físiques. Estabilitat termodinàmica i cinètica de les cadenes carbonades. 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, Conceptes de procés homolític i heterolític, nucleòfil i electròfil.

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). Classificació dels poliens. Estructura electrònica d'alquins. Nomenclatura. Propietats físiques (acidesa). Preparació d'alquins (acetilè). Reactivitat.

5. 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. Propietats físiques i basicitat. Nomenclatura. Formació. Reactivitat. Sals d'amoni.



Programa de Química Orgànica Curs 2006-2007

9. Aldehids i cetones

Estructura i reactivitat del grup carbonil. Formació. Síntesis industrials. 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-). Enolització 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.

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 Orgànica. Estructura y Función* (3^a Ed.), Omega, 2000.
- ◆ P.Y. Bruice. *Organic Chemistry* (3^a Ed) Prentice-Hall International, 2001.
- ◆ S.N. Ege. *Química Orgànica* (3^a Ed.), reverté, Barcelona, 1997.
- ◆ W.R. Peterson. *Formulación y nomenclatura en Química Orgànica*, EUNIBAR, 1987.
- ◆ E. Quiñoá; R. Riguera *Nomenclatura y Representación de los Compuestos Orgánicos*, McGraw-Hill, 1996.

Horari de classes presencials:

Teoria: Dilluns (11:00-12:00 h), dimarts (12:00-13:00 h) i dijous (11:00-12:00h)

Problemes: Divendres de 12:00 a 13:00 h (Professora: Javier Pérez)