



FACULTAT DE  
FARMÀCIA



UNIVERSITAT DE BARCELONA

U

B

T/  
21

# QUÍMICA ORGÀNICA I



Curs  
2008-09

Ensenyament de Farmàcia



UNIVERSITAT DE BARCELONA



**Pla docent de l'assignatura**  
**QUÍMICA ORGÀNICA I**

**Dades generals de l'assignatura**

**Nom de l'assignatura:** Química Orgànica I

**Codi de l'assignatura:** 243016

**Curs acadèmic:** 2008-2009

**Coordinació:** ANTONIO DELGADO CIRILO

**Departament:** Dept. Farmacologia i Química Terapèutica

**Crèdits:** 6

**Recomanacions**

Es recomana que l'alumne tingui al dia els coneixements adquirits al batxillerat sobre la matèria. També és fonamental el treball continu i personal durant el curs, amb especial dedicació a la resolució dels exercicis proposats a classe.

**Competències que es desenvolupen en l'assignatura**

**Genèriques**

Capacitat d'organització i cerca d'informació en webs i bases de dades.

Capacitat de resolució de problemes.

Raonament crític.

Aprentatge autònom.

Iniciativa.

**Específiques**

Connexament dels conceptes i fonaments objecte d'estudi en l'assignatura.

Utilització de vocabulari i terminologia específica de la matèria.



Capacitat de relacionar conceptes i aplicació a la resolució de qüestions concretes.

## Objectius d'aprenentatge de l'assignatura

### Referits a coneixements

- Comprensió de la química dels derivats de carboni en el seu aspecte tridimensional: l'estructura d'un compost orgànic depèn de la composició, constitució, configuració i conformació.
- Coneixement de les propietats físiques dels compostos orgànics mitjançant l'anàlisi de les propietats dels enllaços i les forces intermoleculares.
- Racionalització de les propietats i la reactivitat bàsica dels compostos orgànics amb enllaços senzills.
- Coneixements generals sobre la implicació singular dels compostos orgànics en la consecució dels actuals nivells de benestar social.
- Comprendre l'estreta relació entre estructura i reactivitat. L'alumnat haurà d'adquirir un perfecte domini en les representacions de les formes ressonants de compostos i intermedis orgànics i saber-ne deduir la implicació en aspectes com ara la reactivitat, l'estabilitat termodinàmica i els mecanismes de reacció.
- Conèixer de manera precisa l'estructura, així com les propietats físiques i àcid-base associades a cada grup funcional.

### Referits a habilitats, destreses

- Saber utilitzar les regles bàsiques de nomenclatura de la IUPAC de manera que sigui capaç d'anomenar i de formular molècules orgàniques de nivell molecular senzill.
- Saber emprar apropiadament els diferents termes estereoquímics, en particular els que es refereixen a l'estereoisomeria derivada de la presència de centres estereogènics.
- Saber representar les molècules orgàniques en les diferents projeccions (tridimensionals, de Newman i de Fischer). En relació amb aquest punt, ha d'aplicar els elements bàsics d'anàlisi conformacional, especialment en anells de sis membres i en casos de rotació a l'entorn d'enllaços senzills C-C en sistemes acíclics.
- Dominar la reactivitat bàsica dels grups funcionals amb enllaços senzills i els factors que la modulen i condicionen.

### Bloc 1 Aspectes generals dels compostos orgànics

#### 1 Introducció: química orgànica i nomenclatura

Química del carboni: introducció històrica i actualitat de la química orgànica. Tipus de fórmules. Constitució (connectivitat). Isomeria. Esquelet carbonat i grups funcionals. Fonaments de la nomenclatura IUPAC d'hidrocarburs i grups funcionals: arrel, prefixos, sufixos, multiplicadors i localitzadors.

#### 2 Estructura i enllaç dels compostos orgànics I

Compostos iònics i covalents. Enllaç iònic i enllaç covalent. Estructures de Lewis. Càrregues formals. Orbitals atòmics. Orbitals moleculars. Enllaç  $\sigma$  Orbitals híbrids: àtoms de carboni tetraèdrics. Altres àtoms amb enllaç n hibridació  $sp^3$ . L'enllaç covalent als alcans, alcohols, èters i amines. Àtoms de carboni trigonals. Hibridació  $sp^2$ . L'enllaç covalent als alquens. L'enllaç covalent als compostos carbonílics. Molècules lineals: hibridació  $sp$ . L'enllaç covalent als alquins. L'enllaç covalent als nitrils. Geometria de les molècules orgàniques: geometria tetraèdrica, trigonal i lineal.

#### 3 Estructura i enllaç dels compostos orgànics II

Hibridació d'orbitals i electronegativitat de l'àtom de carboni. Longituds dels enllaços covalents i la seva relació amb la hibridació. Força dels enllaços covalents: energies de dissociació i valors mitjans d'energia d'enllaç. Enllaços múltiples. Ressonància. Formes en resonància. Estructura del benzè. La polaritat de les molècules covalents. Efecte inductiu. Moments dipolars. Interaccions no enllaçants entre molècules: interaccions dipol-dipol, de Van der Waals i enllaços per pont d'hidrogen. Propietats físiques: punts d'ebullició i solubilitat. Exemples: haloalcans, alcohols, èters i amines.

#### 4 Reaccions dels compostos orgànics com a àcids i com a bases

Àcids i bases de Brønsted i de Lewis. Reaccions dels compostos orgànics com a àcids i bases. L'ús de fletxes per descriure mecanismes. Acidesa dels enllaços C-H, N-H, O-H, etc. Acidesa i basicitat relatives al llarg d'un període de la taula periòdica. Acidesa i basicitat relatives dins un grup de la taula periòdica. Els cations orgànics com a àcids. Equilibris àcid-base. Constants d'acidesa i  $pK_a$ . Ús de les taules de valors de  $pK_a$  en la predicció de les reaccions àcid-base. Efecte dels canvis estructurals sobre l'acidesa i la basicitat. Efectes ressonants i inductius. Estabilització de carbanions.

Alcohols; ions alcòxid i oxoni. Alcohols i tiols: analogies i diferències en les seves propietats. Amines. Estructura i propietats físiques. Acidesa i basicitat. Ions amoni i amidur. Formació de sals. Sals d'amoni quaternari. Òxids d'amina. Amines d'interès biològic. Alcaloides.

## **Bloc 2 Estereoisomeria**

### **5 Alcans. Anàlisi conformacional**

Alcans lineals i ramificats. Sèrie homòloga. Grups alquil. Isòmers constitucionals. Estructura i propietats físiques dels alcans. Forces intermoleculars. Petroli. Compostos acíclics: lliure gir. Conformació. Fórmules de cavallet i projeccions de Newman. Anàlisi conformacional dels alcans. Tensió torsional i estèrica.

### **6 Cicloalcans**

Classificació. Estereoisomeria cis/trans. Tensions en els cicloalcans: calors de combustió. Tensió angular. Estructura i conformacions del ciclopropà, ciclobutà i ciclopentà. Ciclohexà: formes de cadira i de bot. Enllaços axials i equatorials. Derivats substituïts del ciclohexà. Cicloalcans superiors: anells mitjans i grans. Alcans bicíclics i policíclics. Decalina i esteroides.

### **7 Estereoisomeria**

Molècules quirals: enantiòmers i racemats. Activitat òptica. Configuració absoluta: les regles seqüencials R-S. Projeccions de Fischer. Convenció de Fischer: D, L. Compostos amb centres estereogènics diferents del carboni. Quiralitat en compostos nitrogenats: la inversió de les amines. Molècules quirals sense centres estereogènics: al·lens. Estereoisomeria deguda a la presència de dos centres estereogènics: enantiòmers i diastereòmers. Formes meso. Nomenclatura eritro-treo. Estereoisomeria deguda a la presència de més de dos centres estereogènics. Epimers. Estereoisomeria E/Z. Resolució de racemats. Estereoisomeria i quiralitat en ciclohexans substituïts. Quiralitat i interacció biològica.

## **Bloc 3 Reactivitat de compostos orgànics amb enllaç senzill**

### **8 Conceptes generals de les reaccions orgàniques**

Equació estequiomètrica. Mecanisme de reacció. Mecanismes concertats o no concertats. Intermedis de reacció. Classificació de les reaccions orgàniques: reaccions heterolítiques (polars), homolítiques (radicalàries) i pericíclicues;

processos d'addició, eliminació, substitució i transposició. Termodinàmica i cinètica de les reaccions orgàniques: repàs dels conceptes generals. Un exemple de reacció heterolítica: l'enllaç carboni-metall: compostos organometàl·lics. Comportament dels compostos organometàl·lics com a bases. Preparació de compostos organolítics i de Grignard. Un exemple de reacció radicalària: halogenació d'alcans. Radicals: estructura i estabilitat. Utilitat sintètica d'aquestes reaccions. Altres grups funcionals amb enllaç senzill: Peròxids d'alquil. Disulfurs. Sulfurs i sals de sulfoni. Sulfòxids i sulfones. Compostos d'interès especial.

### **9 Reaccions de substitució nucleòfila I**

Haloalcans: reacció de substitució nucleòfila. Concepte de nucleòfil, electròfil i grup sortint. Reacció de substitució nucleòfila bimolecular (SN<sub>2</sub>): mecanisme i curs estereoquímic. Factors que influeixen en el mecanisme SN<sub>2</sub>: substrat, nucleòfil, grup sortint i dissolvent. Solvòlisi d'haloalcans terciaris: substitució nucleòfila monomolecular (SN<sub>1</sub>): mecanisme i curs estereoquímic. Factors que influeixen en el mecanisme SN<sub>1</sub>: estabilitat de carbocacions i efecte del dissolvent. Transposicions. SN<sub>1</sub> enfront de SN<sub>2</sub>.

### **10 Reaccions de substitució nucleòfila II**

Altres substrats anàlegs: sulfonats d'alquil. Utilitat sintètica de la reacció de substitució nucleòfila: síntesi d'èters de Williamson. Síntesi d'altres grups funcionals. Les amines com a nucleòfils. Els alcohols i èters com a substrats en reaccions de substitució nucleòfila: conversió en haloalcans i ruptura d'èters en medi àcid. Reaccions dels epòxids. Reaccions de substitució nucleòfila en bioquímica.

### **11 Reaccions d'eliminació**

Reaccions d'eliminació dels haloalcans. Eliminació monomolecular (E<sub>1</sub>):

*meccanisme Eliminació bimolecular (E<sub>2</sub>): mecanisme i curs estereoquímic*

Regioselectivitat i estereoselectivitat. Competència substitució-eliminació. Reaccions d'eliminació de compostos relacionats: sulfonats. Sals d'amoni: eliminació de Hofmann. Deshidratació d'alcohols. Altres eliminacions: N-òxids i sulfòxids.

### **Programa de seminaris**

- 1 Nomenclatura bàsica dels compostos orgànics
- 2 Estructura i propietats físiques dels compostos orgànics



processos d'addició, eliminació, substitució i transposició. Termodinàmica i cinètica de les reaccions orgàniques: repàs dels conceptes generals. Un exemple de reacció heterolítica: l'enllaç carboni-metall: compostos organometàl·lics. Comportament dels compostos organometàl·lics com a bases. Preparació de compostos organolítics i de Grignard. Un exemple de reacció radicalària: halogenació d'alcans. Radicals: estructura i estabilitat. Utilitat sintètica d'aquestes reaccions. Altres grups funcionals amb enllaç senzill: Peròxids d'alquil. Disulfurs. Sulfurs i sals de sulfoni. Sulfòxids i sulfones. Compostos d'interès especial.

### **9 Reaccions de substitució nucleòfila I**

Haloalcans: reacció de substitució nucleòfila. Concepte de nucleòfil, electròfil i grup sortint. Reacció de substitució nucleòfila bimolecular (SN2): mecanisme i curs estereoquímic. Factors que influeixen en el mecanisme SN2: substrat, nucleòfil, grup sortint i dissolvent. Solvòlisi d'haloalcans terciaris: substitució nucleòfila monomolecular (SN1): mecanisme i curs estereoquímic. Factors que influeixen en el mecanisme SN1: estabilitat de carbocacions i efecte del dissolvent. Transposicions. SN1 enfront de SN2.

### **10 Reaccions de substitució nucleòfila II**

Altres substrats anàlegs: sulfonats d'alquil. Utilitat sintètica de la reacció de substitució nucleòfila: síntesi d'èters de Williamson. Síntesi d'altres grups funcionals. Les amines com a nucleòfils. Els alcohols i èters com a substrats en reaccions de substitució nucleòfila: conversió en haloalcans i ruptura d'èters en medi àcid. Reaccions dels epòxids. Reaccions de substitució nucleòfila en bioquímica.

### **11 Reaccions d'eliminació**

Reaccions d'eliminació dels haloalcans. Eliminació monomolecular (E1): mecanisme. Eliminació bimolecular (E2): mecanisme i curs estereoquímic. Regioselectivitat i estereoselectivitat. Competència substitució-eliminació. Reaccions d'eliminació de compostos relacionats: sulfonats. Sals d'amoni: eliminació de Hofmann. Deshidratació d'alcohols. Altres eliminacions: N-òxids i sulfòxids.

### **Programa de seminaris**

- 1 Nomenclatura bàsica dels compostos orgànics
- 2 Estructura i propietats físiques dels compostos orgànics



- 3 Reaccions àcid-base dels compostos orgànics
- 4 Estereoisomeria i anàlisi conformacional
- 5 Reaccions orgàniques que afecten els compostos amb enllaços senzills

### **Metodologia i organització general de l'assignatura**

Les classes teòriques (4,5 crèdits teòrics; 1 crèdit = 10 h) seran de tipus magistral i, encara que fonamentalment les lliçons es desenvoluparan a la pissarra es farà servir també material audiovisual. Tanmateix, la discussió de qüestions serà promoguda pel professor i a instàncies de qualsevol alumne.

Les classes de seminaris (1,5 crèdits pràctics; 1 crèdit = 10 h), fonamentalment dirigides a la resolució de problemes, seran actives amb participació directa de l'alumnat. Aquestes classes són complementàries (aplicacions) i de suport als continguts de les classes teòriques.

S'aconsella que l'estudiant dediqui un mínim d'una hora d'estudi per hora de classe impartida pel professor i és important que consulti, com a mínim, un llibre de text general de química orgànica (vegeu l'apartat 6.1, «Bibliografia bàsica»).

### **Avaluació acreditativa dels aprenentatges de l'assignatura**

L'avaluació continuada del crèdits teòrics i pràctics (seminaris i problemes) es durà a terme mitjançant tres proves de seguiment (20% del total) i un examen final (80% del total). Les proves de seguiment es realitzaran de forma presencial dins de l'horari de classes de l'assignatura i seran anunciades amb suficient antelació. La qualificació de les proves de seguiment es conservarà per a la segona convocatòria, en les mateixes condicions que en la primera.

Tant les proves de seguiment com l'examen final constaran de preguntes curtes de raonament i resolució de problemes. A criteri dels professors de l'assignatura, les preguntes podran ser formulades com a examen tipus test.

L'avaluació de la segona convocatòria es durà a terme mitjançant un examen final



que computarà per un 80% de la nota global. El 20% restant s'obindrà de les proves de seguiment qualificades al llarg del primer quadrimestre.

### **Avaluació única**

L'avaluació dels crèdits teòrics i pràctics (seminaris i problemes) es durà a terme mitjançant un examen final al mes de gener. L'examen serà únic per a tots els grups de docència.

Constarà de preguntes curtes, preguntes de raonament i resolució de problemes. A criteri dels professors de l'assignatura, les preguntes poden estar formulades com a examen tipus test. La data límit per acollir-se a la modalitat d'avaluació única és el 10 d'octubre.

### **Fons d'informació bàsiques de l'assignatura**

#### **Llibres**

- VOLLHARDT, K. P. C.; SCHORE, N. E. Química orgánica. 3a ed. Barcelona: Omega, 2000. ⇨
- Material complementari a VOLLHARDT, K. P. C.; SCHORE, N. E. Organic Chemistry Web Site. Disponible a: ⇨
- DEWICK, P. Essentials of organic Chemistry. Hoboken: Wiley; 2006. ⇨
- WADE, JR., L. G. Química orgánica. 5a ed. Madrid: Pearson Prentice Hall, 2004. ⇨
- CAREY, F. A. Química orgánica. 6a. ed. México: McGraw-Hill/Interamericana de España; cop. 2006. ⇨
- SOLOMONS, T. W. G. Química orgánica. 2a ed. Mèxic: Limusa Wiley, 1999. ⇨
- EGE, S. Química orgánica. Estructura y reactividad. vol. 1. Barcelona: Reverté, 1997. ⇨
- QUIÑOJA, E.; RIGUERA, R. Cuestiones y ejercicios de química orgánica. Una guía de estudio y autoevaluación. Madrid: McGraw-Hill, 1994. ⇨
- CAREY, F. A.; ATKINS, R. C. Study guide and solutions manual to accompany organic chemistry. 7th ed. Boston: McGraw Hill; cop. 2008. ⇨
- SCHORE, N. E. Study guide and solutions manual for organic chemistry. 4th ed. New York: Freeman; 2003. ⇨



- SOLOMONS, T. W. G. Química orgánica. Guía de estudio y respuestas. México: Limusa Wiley, 1999. →
- QUIÑOJA, E.; RIGUERA, R. Nomenclatura y representación de los compuestos orgánicos. Una guía de estudio y autoevaluación. Madrid: McGraw-Hill, 1996. ⇒
- SALES, J., VILARRASA, J. Introducció a la nomenclatura química inorgànica i orgànica. 5a ed. Editorial Reverté, 2003. ⇔
- IUPAC. Nomenclatura de química orgánica (Secciones A-H, Unión Internacional de Química Pura y Aplicada). Madrid: CSIC, RSEQ, 1987.
- IUPAC. Nomenclatura de química orgànica (Seccions A, B i C. Regles definitives de 1979). Barcelona: Institut d'Estudis Catalans, 1989. ⇒
- PETERSON, W. R. Formulació y nomenclatura, química orgánica. 5a ed. Barcelona: Eunibar; 1995 →
- MAULEÓN, D.; DELGADO, A. Manual de nomenclatura química sistemática de los fármacos (Aplicación de la normativa IUPAC y ejercicios resueltos). Barcelona: PPU; 1987. →