

Tema 4. Fonaments de Química Orgànica

4.1. Introducció a la Química Orgànica

4.1.1. Breu història i justificació de la Química Orgànica

4.1.2. L'àtom de carboni

4.1.3. Classificació dels compostos orgànics

4.1.4. Representació dels compostos orgànics

4.2. Propietats generals dels diferents tipus de compostos orgànics

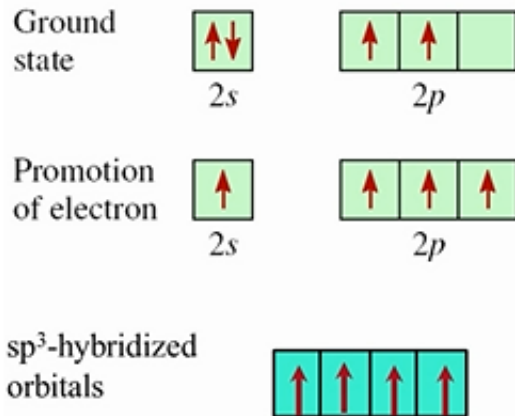
4.3. Nucleòfil/electròfil i moviment d'electrons

4.4. Isòmers

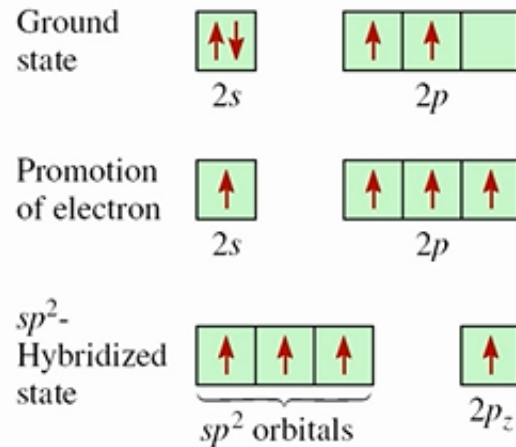
4.5. Introducció a les biomolècules

L'àtom de carboni - hibridacions

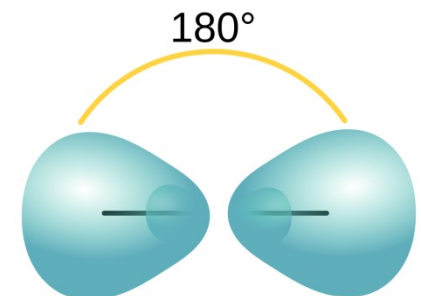
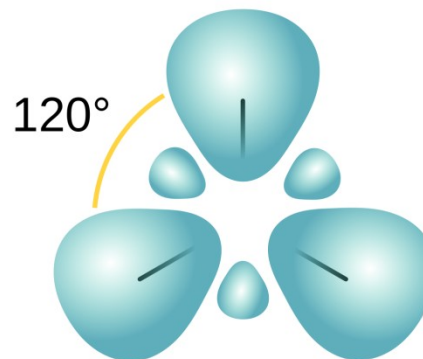
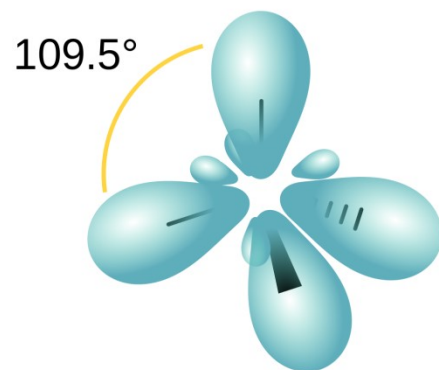
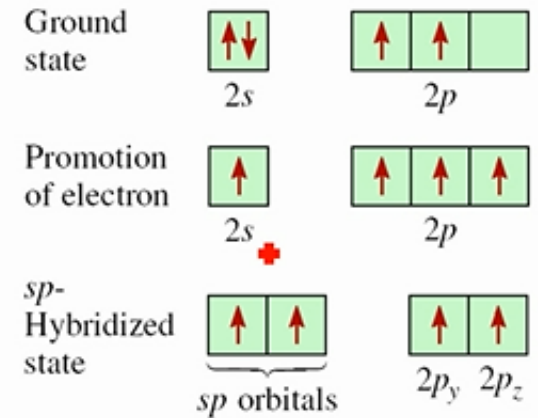
sp^3 Hybridization of Carbon



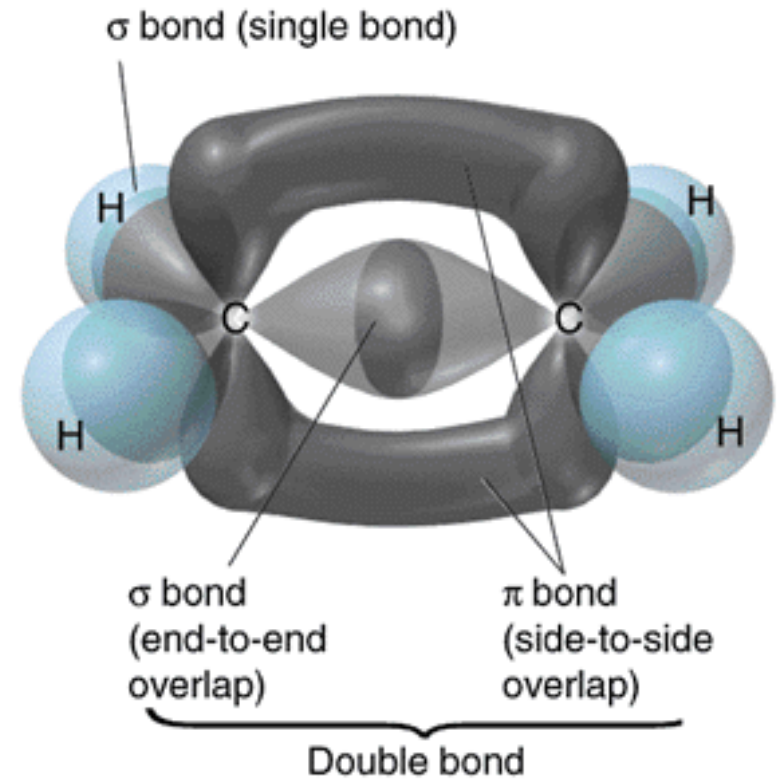
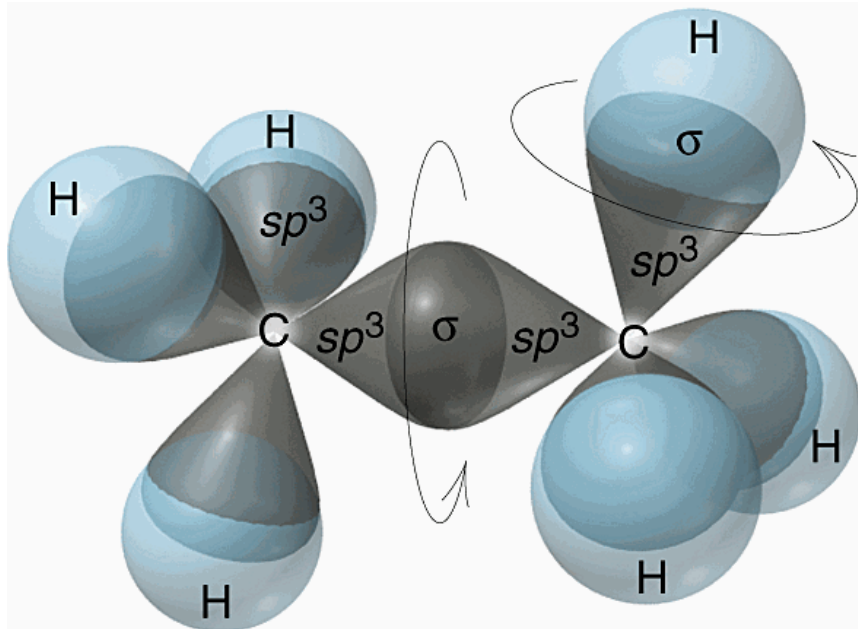
sp^2 Hybridization of Carbon



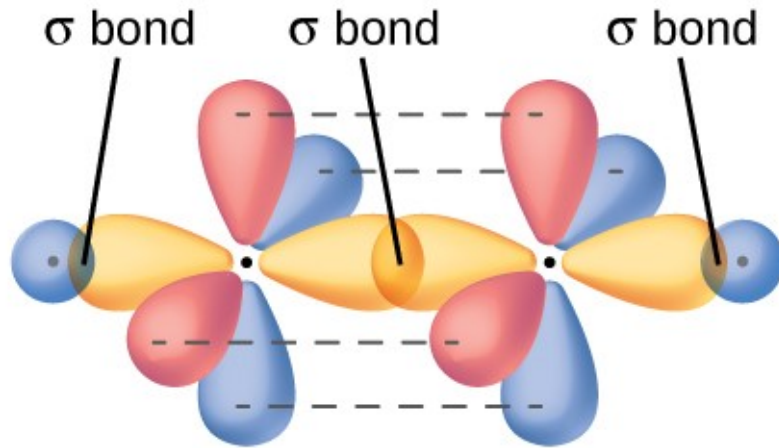
sp Hybridization of Carbon



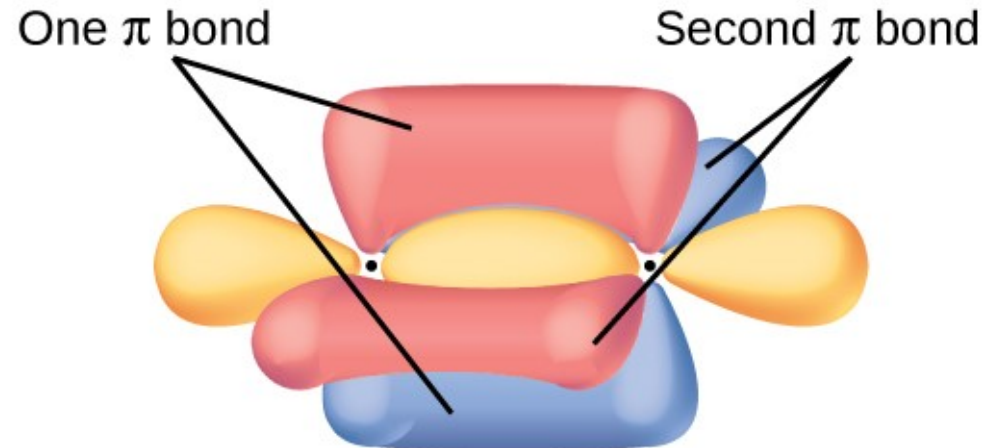
L'àtom de carboni



L'atòm de carboni



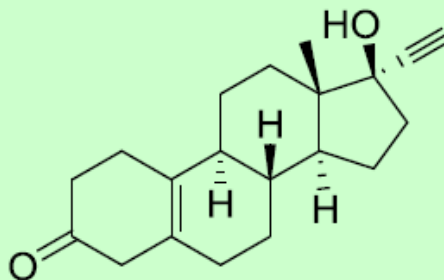
(a)



(b)

L'àtom de carboni

Exercici 4.1. Indica la hibridació i la geometria de cada un dels àtoms de carboni del noretinodrel, que en combinació amb el mestranol, formava el principi actiu de la primera píndola anticonceptiva oral que es va comercialitzar.

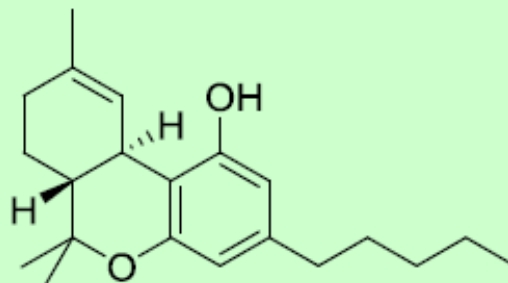


Noretinodrel

L'àtom de carboni

Exercici 4.2. Indica en el tetrahidrocannabinol, principal constituent psicoactiu del cànnabis, els conjunts d'àtoms que estan en un mateix pla.

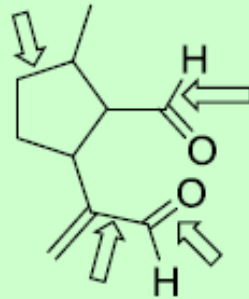
Nota: cal considerar la geometria dels àtoms depenent de la seva hibridació.



Tetrahidrocannabinol

L'àtom de carboni


Exercici 4.3. Indiqueu els tipus d'orbitals que es solapen per formar els enllaços marcats amb una fletxa.



Classificació dels compostos orgànics

El **grau d'oxidació** es defineix com el nombre de valències que un àtom de carboni dedica a la seva unió amb àtoms més electronegatius que ell.

Taula 4.1. Principals famílies de compostos orgànics segons el grau d'oxidació del seu grup funcional.

| Grau d'oxidació | Classe | Fórmula general |
|------------------|----------------|--|
| 0 (Hidrocarburs) | Alcans | R-H |
| | Alquens | $\begin{array}{c} \text{R} \quad \text{R}'' \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{C}=\text{C} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{R}' \quad \text{R}''' \end{array}$ |
| | Alquins | $\text{R-C}\equiv\text{C-R'}$ |
| | Arens |  |
| 1 | Halur d'alquil | R-X (X= F, Cl, Br, I) |
| | Alcohol | R-OH |
| | Èter | R-O-R' |
| | Tiol | R-SH |
| | Tioèter | R-S-R' |
| | Amina | R-NH_2 primària |
| | | $\begin{array}{c} \text{R-NH} \quad \text{secundària} \\ \\ \text{R}' \end{array}$ |
| | | $\begin{array}{c} \text{R-N-R''} \quad \text{terciària} \\ \\ \text{R}' \end{array}$ |

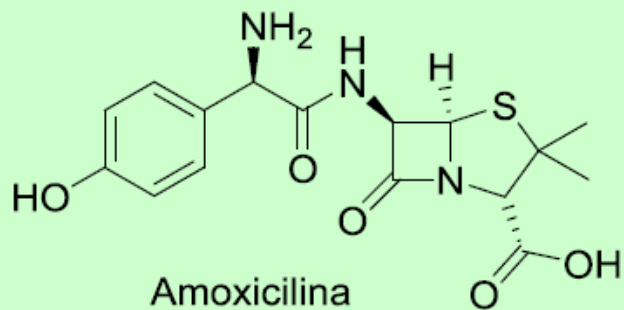
Classificació dels compostos orgànics

Taula 4.1. Principals famílies de compostos orgànics segons el grau d'oxidació del seu grup funcional.

| Grau d'oxidació | Classe | Fórmula general |
|-----------------|-----------------|---|
| 2 | Aldehid | $\text{R}-\overset{\text{O}}{\underset{\parallel}{\text{C}}}-\text{H}$; $\text{R}-\text{CHO}$ |
| | Cetona | $\text{R}-\overset{\text{O}}{\underset{\parallel}{\text{C}}}-\text{R}'$; RCOR' |
| 3 | Àcid carboxílic | $\text{R}-\overset{\text{O}}{\underset{\parallel}{\text{C}}}-\text{OH}$; RCO_2H |
| | Halur d'acil | $\text{R}-\overset{\text{O}}{\underset{\parallel}{\text{C}}}-\text{X}$; RCOX (X = F, Cl, Br, I) |
| | Èster | $\text{R}-\overset{\text{O}}{\underset{\parallel}{\text{C}}}-\text{OR}'$; $\text{RCO}_2\text{R}'$ |
| | Amida | $\text{R}-\overset{\text{O}}{\underset{\parallel}{\text{C}}}-\text{NH}_2$; RCONH_2 |
| | Nitril | $\text{R}-\text{C}\equiv\text{N}$; R-CN |

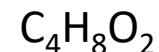
Classificació dels compostos orgànics

Exercici 4.4. Identifica i anomena els grups funcionals presents en l'amoxicilina, substància amb conegudes propietats antibiòtiques.

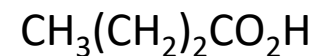


Representació dels compostos orgànics

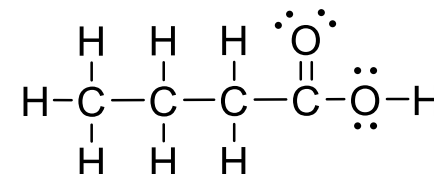
a) **Fórmula molecular:** expressió del tipus i nombre d'àtoms presents en una molècula. En química orgànica es comencen expressant els àtoms de carboni, seguits dels d'hidrogen i la resta d'heteroàtoms en ordre alfabètic.



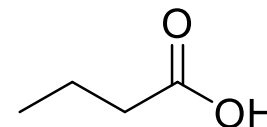
b) **Fórmules condensades:** en aquesta fórmula no es representen els enllaços i els grups iguals s'indiquen entre parèntesis amb un subíndex (excepte per l'hidrogen on no s'utilitza el parèntesi).



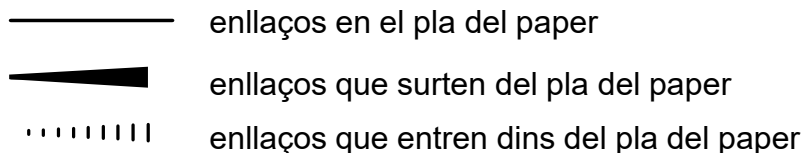
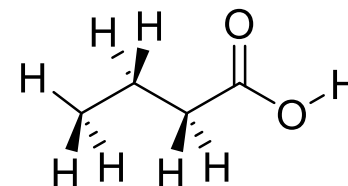
c) **Fórmula estructural:** representació de tots els enllaços covalents i els parells d'electrons no compartits (estructura de Lewis). Sovint els parells d'electrons no compartits no es representen



d) **Línies i angles:** Representació de les cadenes carbonades en ziga-zaga i els compostos cíclics com a poliedres regulars. Els hidrògens no es representen, però sí els grups funcionals. Els extrems de la cadena i els angles representen àtoms de carboni.



e) **Fórmules en perspectiva:** Representació de la geometria de les molècules, que permet conèixer la disposició en l'espai dels àtoms de la molècula.



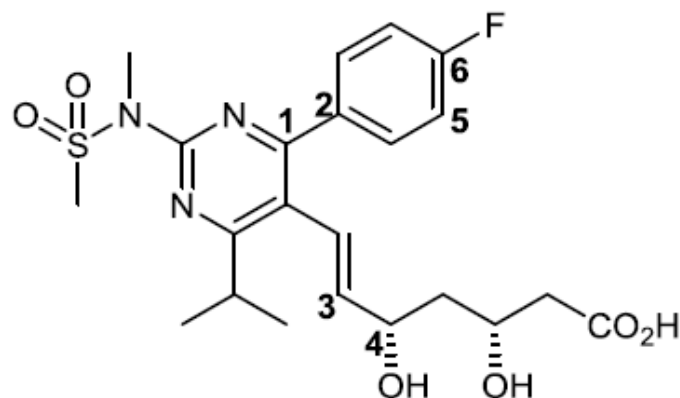
Representació dels compostos orgànics

Exercici 4.6. Dibuixa en línies i angles i en fórmules estructurals els compostos que es llisten a continuació:

- a) 3-isopropiloctà
- b) 2-cloro-3-metilpentà
- c) *cis*-2-pentè
- d) dipropil èter
- e) *p*-bromofenol

COGNOMS NOM DNI

R2) (10 punts) L'estructura de la rosuvastatina, un fàrmac utilitzat per reduir els nivells de colesterol, es mostra a continuació. En base a l'estructura d'aquest fàrmac, contesteu les preguntes que segueixen:



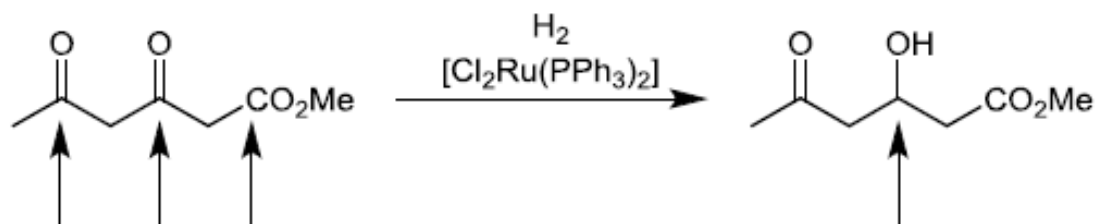
Rosuvastatina

- a) Determineu la fórmula molecular de la rosuvastatina.
- b) Indiqueu si l'alquè en la molècula té geometria *cis* o *trans*.

- c) Indiqueu en la taula a continuació el tipus d'enllaç i els orbitals que es solapen per formar l'enllaç entre els carbonis 1 i 2, 3 i 4, i 5 i 6.

| | Tipus d'enllaç/os | Orbitals que es solapen |
|--------------|-------------------|-------------------------|
| Enllaç C1-C2 | | |
| Enllaç C3-C4 | | |
| Enllaç C5-C6 | | |

- d) Un dels passos en la síntesi de la rosuvastatina es mostra a continuació. Indiqueu el grau d'oxidació dels carbonis assenyalats amb una fletxa en l'esquema i indiqueu si es tracta d'una reacció de reducció o oxidació.



- e) Indiqueu si la rosuvastatina serà o no soluble en aigua. Justifiqueu la vostra resposta.