

Química orgànica

2012/2013

Codi: 100914

Crèdits ECTS: 6

Titulació	Pla	Tipus	Curs	Semestre
2500253 Graduat en Biotecnologia	815 Graduat en Biotecnologia	FB	1	2

Professor de contacte

Nom: Rosa Maria Sebastián Pérez

Correu electrònic: RosaMaria.Sebastian@uab.cat

Utilització d'idiomes

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Algun grup íntegre en anglès: No

Algun grup íntegre en català: Sí

Algun grup íntegre en espanyol: No

Prerequisits

Tot i no haver pre-requisits oficials, **és convenient** que l'estudiant:

- 1) Hagi aprovat l'assignatura de primer semestre: "Fonaments de Química" i que repassi els coneixements adquirits en aquesta assignatura.
- 2) Repassi els coneixements bàsics que hagi adquirit durant en els seus estudis previs sobre química orgànica: nomenclatura i grups funcionals.

Objectius

La Química orgànica estudia la química del carboni. Els éssers vius estan formats per compostos on la seva base principal és aquest àtom. És una matèria bàsica i fonamental per entendre els processos vitals en els éssers vius; processos que s'estudiaran en altres assignatures d'aquest Grau.

En aquesta assignatura es proporciona la base introductòria de la química dels compostos de carboni. S'analitzarà l'estructura dels compostos, les seves conformacions i l'estereoquímica, mostrant sempre la importància d'aquests conceptes en l'activitat dels enzims i d'alguns compostos en l'organisme. Es presentaran també els diversos grups funcionals que apareixen en els compostos orgànics. Es donaran les pautes per entendre la reactivitat de les molècules orgàniques i es posaran exemples d'aquesta en processos biològics a fi d'entendre'ls.

Els **objectius formatius** de l'assignatura es poden resumir en:

- 1.- Comprendre la necessitat de conèixer la reactivitat de les molècules orgàniques amb el fi d'entendre els mecanismes biològics.
- 2.- Conèixer els grups funcionals més comuns que poden estar presents en molècules orgàniques.
- 3.- Saber nomenar i reconèixer compostos orgànics.
- 4.- Poder predir les propietats físiques de compostos orgànics en funció de la seva estructura i de les interaccions inter e intramoleculars.
- 4.- Saber identificar les diferents estructures que poden tenir compostos amb la mateixa fórmula molecular (isòmers) i veure com petits canvis afecten molt a les seves propietats i activitats.
- 5.- Comprendre la reactivitat de les molècules orgàniques, depenent dels grups funcionals que presenten a les

seves estructures, i poder entendre el funcionament dels processos biològics fonamentals.

6.- Conèixer l'estructura de diversos metabòlits primaris i la seva potencial reactivitat.

Competències

- Buscar i gestionar informació procedent de diverses fonts.
- Llegir textos especialitzats tant a llengua anglesa com a les llengües pròpies.
- Raonar de forma crítica.
- Treballar de forma individual i en equip.
- Utilitzar els fonaments de matemàtiques, física i química necessaris per a comprendre, desenvolupar i avaluar un procés biotecnològic.

Resultats d'aprenentatge

1. Buscar i gestionar informació procedent de diverses fonts.
2. Descriure els mecanismes i principals tipus de reaccions dels principals compostos orgànics i dels seus derivats, així com la seva aplicació en sistemes biològics.
3. Distingir i descriure els diferents tipus d'interaccions inter- o intramoleculars no covalents en compostos químics de rellevància biològica, així com identificar els grups funcionals orgànics.
4. Identificar la naturalesa i les propietats químiques dels composts del metabolisme primari.
5. Llegir textos especialitzats tant a llengua anglesa com a les llengües pròpies.
6. Manipular adequadament equacions químiques, igualar-les i efectuar càlculs estequiomètrics.
7. Raonar de forma crítica.
8. Treballar de forma individual i en equip.

Continguts

Introducció a l'enllaç als compostos químics

Enllaç químic. Enllaç covalent: estructures de Lewis, geometria molecular, ressonància, àcids i bases de Lewis, electronegativitat, polaritat. Hibridacions i tipus de solapaments d'orbitals. Enllaços covalents senzills i múltiples: geometria i propietats. Interaccions inter- i intramoleculars no covalents.

Compostos orgànics

Estructura i fórmules de les molècules orgàniques. Classificació dels compostos orgànics: grups funcionals; grau d'oxidació.

Hidrocarburs: alcans, alquens, alquins i hidrocarburs aromàtics. Compostos orgànics de primer grau d'oxidació: halurs orgànics, alcohols, fenols, èters, tiols i amines. Compostos de segon grau d'oxidació: aldehids i cetones. Compostos de tercer grau d'oxidació: àcids i els seus derivats. Nomenclatura, estructura i propietats físiques.

Anàlisi conformacional i estereoquímica

Isomeria estructural o constitucional. Isòmers conformacionals. Anàlisi conformacional d'alcans (età i *n*-butà). Tensió anular de cicloalcans i anàlisi conformacional del ciclohexà. Isomeria *cis-trans* ciclànica. Isomeria *Z-E* d'alquens.

Estereoisòmers: enantiòmers i diastereòmers. Quiralitat. Activitat òptica: poder rotatori. Mescles racèmiques. Importància dels compostos quirals als éssers vius. Configuració: representació i nomenclatura *R-S*. Compostos amb més d'un centre asimètric: formes *meso*.

Reaccions orgàniques

Termodinàmica i cinètica aplicada a reaccions orgàniques. Intermedis i perfils de reacció. Classificació de les

reaccions orgàniques: reaccions d'addició, eliminació, substitució i d'altres. Concepte d'electròfil i nucleòfil.

Addició a enllaços múltiples carboni-carboni

Reaccions d'addició al doble enllaç carboni-carboni. Addició d'halurs d'hidrogen; intermedis catiónics, regla de Markovnikoff. Addició d'aigua catalitzada per àcids. Addició d'alcohols. Addició d'halògens. Addició d'hidrogen: calors d'hidrogenació i estabilitat dels dobles enllaços. Oxidació d'alquens. Addició a triples enllaços. Exemples biològics.

Substitució nucleòfila a carboni saturat

Conceptes generals. Substitucions nucleòfiles sobre halurs d'alquil, alcohols i derivats. Reaccions S_N1 i S_N2 : mecanismes, cinètica i estereoquímica. Factors que afecten a les reaccions de substitució. Aplicacions sintètiques. Preparació d'alcohols, èters, halurs d'alquil, tiols i tioèters, amines i derivats de nitril. Aplicacions biosintètiques.

Reaccions d'eliminació

Reaccions d'eliminació E1 i E2: cinètica i mecanismes. Regioquímica (regla de Zaitsev) i estereoquímica de la reacció. Competència amb les reaccions de substitució. Formació de dobles enllaços C-O.

Addició nucleòfila al grup carbonil

Reactivitat del grup carbonil: estructura electrònica, mecanismes d'addició. Addició d'alcohols: hemiacetals (ex. carbohidrats) i acetals. Addició d'amoníac i derivats. Addició de cianur d'hidrogen. Addició d'hidrur: NADH. Addició d'enolats: condensació aldòlica. Quinones.

Substitució nucleòfila a grups carbonil i relacionats

Compostos de tercer grau d'oxidació: estructura electrònica. Mecanisme d'addició-eliminació. Reaccions d'interconversió entre grups funcionals: àcids, halurs d'àcid, anhídrids d'àcid, esters i tioesters i amides. Hidròlisi i saponificació de derivats d'àcids carboxílics. Addició d'hidrur. Substitució per enolats: condensació de Claisen. Biosíntesi dels àcids grassos. Anàlisi d'estructures de compostos biològics relacionats amb el tema: lípids, aminoàcids i peptids. Derivats orgànics de l'àcid fosfòric.

Substitució electròfila aromàtica

Aromaticitat. Mecanisme de la S_EAr . Exemples: halogenació, nitració, sulfonació, alquilació i acilació de Friedel-Crafts. Reactivitat i orientació. Compostos heterocíclics aromàtics. Bases púriques i pirimidíniques.

Metodologia

L'assignatura de Química Orgànica s'organitzarà en classes assistencials setmanals, dues classes teòriques i una de problemes. Les classes de problemes es faran en dos grups en dies diferents.

A continuació analitzarem aquestes sessions presencials, així com altres activitats que es duran a terme per tal d'aconseguir un millor aprenentatge de l'alumnat.

Classes teòriques magistrals

Durant aquestes classes el professor transmetrà els coneixements bàsics de la matèria; coneixements que s'hauran de complementar amb el treball individual de l'alumne consultant la bibliografia que el professor li indicarà així com participant i realitzant les activitats programades. Les classes magistrals són un tipus d'activitat que exigeix poca interactivitat amb l'estudiant; estan concebudes com un mètode fonamentalment unidireccional de transmissió de coneixements del professor cap a l'alumne. Durant les classes s'intentarà fer participar als estudiants fent qüestions que s'hauran de resoldre entre els alumnes utilitzant els coneixements previs d'aquests i aquells que s'aniran adquirint al llarg del curs.

Durant les classes magistrals s'aniran definint i lliurant els exercicis que els alumnes hauran d'anar resolent al

llarg del curs. S'utilitzarà el Campus Virtual de la UAB per publicar tant el material utilitzat a classe, com altre que pugui ser formatiu en aquesta matèria, així com els exercicis que s'hagin d'anar resolent.

Classes de problemes

S'entregarà un dossier d'exercicis que els alumnes hauran d'anar resolent al llarg del curs. Una part seleccionada d'aquests exercicis serà resolta pels professors de problemes per tal que els alumnes aprenguin la metodologia adequada per trobar les solucions. Durant aquest procés s'intentarà que la participació de l'alumnat sigui important. El professorat ajudarà a desenvolupar el sentit crític i el raonament lògic, per tal d'augmentar la capacitat dels alumnes de resoldre problemes.

Resolució d'exercicis a lliurar (treball individual)

Al llarg de l'assignatura, a mida que es vagin acabant els temes, el professor anirà entregant exercicis que permetin a l'alumne reforçar i practicar els coneixements bàsics de la matèria que el professor haurà mostrat a classe. Aquests exercicis s'hauran de fer de forma individual i s'hauran de lliurar en format paper; formaran part de l'avaluació continuada del curs (activitat obligatòria).

Primer examen parcial

La química és una matèria que s'ha de treballar dia a dia. Per tal que els alumnes vagin treballant el temari de forma continuada el professor de l'assignatura prepararà uns exercicis que s'hauran de lliurar. Juntament amb aquests indicis sobre l'aprenentatge dels alumnes, es prepararà un primer examen parcial, que recollirà aproximadament el 50% de la matèria de l'assignatura. La primera part dels continguts són molt pràctics i es considera interessant fer aquest examen per comprovar que els alumnes els han entès i els van portant al dia.

Segon examen parcial

La segona part de l'assignatura es centra principalment en la reactivitat dels diferents grups funcionals, fent èmfasi en els mecanismes d'aquestes reaccions. La segona prova d'avaluació de l'assignatura es farà una vegada acabades les classes teòriques i estarà principalment centrada en aquesta reactivitat, tot i que pot incloure alguns dels conceptes que ja s'hagin avaluat en el primer examen parcial.

Aquests exàmens estaran principalment constituïts per exercicis pràctics a resoldre i algunes qüestions teòriques curtes.

Amb totes aquestes activitats es pretén que els alumnes assoleixin els continguts de l'assignatura amb un treball continuat.

Programació de l'assignatura

Durant la realització de l'assignatura, s'hauran de lliurar uns exercicis al professor de teoria per tal de formar part de l'avaluació continuada. No es fixa cap data per aquests lliuraments, ja que depèn de l'evolució del temari i del grup d'alumnes que conformi l'assignatura. El temps dedicat a la realització d'aquests exercicis haurà de ser curt (aprox. 1h per lliurament), per lo qual es considera que no suposarà cap càrrega extra important encara que es solapi amb lliuraments d'altres professors.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de problemes	15	0,6	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8
Classes magistrals	30	1,2	2, 3, 4, 6, 7
Resolució d'exercicis a lliurar	16	0,64	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8

Treball autònom	84,8	3,39	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8
-----------------	------	------	------------------------

Avaluació

L'avaluació d'aquesta assignatura s'intentarà fer d'una manera continuada, amb el fi d'assolir uns objectius principals:

- 1.- Monitoritzar el procés d'ensenyament aprenentatge, permetent tant a l'alumne com al professor conèixer el grau d'assoliment de les competències i corregir, si és possible, les desviacions que es produeixin.
- 2.- Incentivar l'esforç continuat de l'alumne enfront del sobre esforç, freqüentment inútil, d'estudiar a última hora per l'examen final.
- 3.- Verificar que l'alumne ha assolit les competències determinades en el pla d'estudis.

L'avaluació del curs es farà de forma individual. Aquest seguiment constarà de:

Exercicis a lliurar. Al llarg del curs, a mida que es vagin acabant temes, el professor anirà donant als alumnes exercicis que permetin practicar i reforçar alguns dels coneixements que s'han d'assolir; aquests exercicis quedaran recollits al Campus Virtual de l'assignatura. Les respostes s'hauran de lliurar al professor una setmana després, el dia indicat pel professor. La mitjana de la nota obtinguda amb aquest treball representarà el 5% de la nota global de l'assignatura.

Primer examen parcial. Una vegada impartida durant les classes magistrals aprox. la meitat de la matèria del curs, es farà un examen parcial que permeti comprovar que els alumnes van assolint els coneixements fins al moment. Aquest examen tindrà un pes del 47.5% de la nota global. La prova es farà durant la setmana en aquell horari que la coordinació consideri més addient i s'indicarà la data amb setmanes d'antelació. L'assistència a aquesta provaserà obligatòria per tothom. Per poder fer mitja amb les altres notes del curs, els alumnes hauran d'assolir com mínim un 4 de nota de l'examen. Si no, es consideraran suspesos.

Segon examen parcial. Una vegada acabades les classes teòriques es programarà el segon examen parcial que inclourà pràcticament la segona meitat dels continguts oferts al llarg del curs. Aquest examen estarà centrat principalment en la reactivitat de reaccions orgàniques, els seus mecanismes i els productes obtinguts. Alguns dels conceptes bàsics recollits en el primer examen parcial, com l'estereoquímica dels productes o les diferents projeccions en les que es poden dibuixar les molècules, per exemple, entre d'altres, poden formar part d'aquest segon examen final. El seu pes en la nota final serà també del 47.5% de la nota global. Tots els alumnes s'hauran de presentar a aquest segon examen parcial de forma obligatòria per seguir l'assignatura. Per poder fer mitja amb les altres notes del curs, els alumnes hauran d'assolir com mínim un 4 de nota de l'examen. Si no, es consideraran suspesos.

Els no presentats.

Un alumne matriculat a l'assignatura rebrà la qualificació de "no presentat" si decideix no presentar-se al primer examen parcial. En aquest cas, tampoc tindrà dret a presentar-se només al segon examen parcial. Tots aquells alumnes que hagin fet l'examen parcial es consideraran com presentats encara que decideixin no fer el final.

La revisió dels resultats de cadascuna de les parts que s'utilitzaran per avaluar als alumnes es realitzarà de forma individual en tutories prèviament concertades amb el professor. Hi haurà una data de revisió pels exàmens realitzats que s'indicarà el dia que es facin públiques les notes amb una antelació de 24 hores.

Tal i com queda establert per la Facultat de Biociències, aquesta assignatura només constarà d'una convocatòria. No hi haurà cap prova de recuperació. Es considerarà aprovada l'assignatura si la nota global es igual o superior a 5. Si la nota de l'alumne en algun dels dos exàmens parcials és inferior a 4, es considerarà a l'alumne suspès de l'assignatura, ja que es considera que de cada part s'han d'assolir uns coneixements mínims.

En cas que algun alumne no pugui realitzar alguna de les proves obligatòries per causes ben justificades, presentant els certificats corresponents que ho confirmin, es concertarà una altra data

amb el professor de l'assignatura per poder-la dur a terme. S'ha d'avisar al professor el més aviat possible per e-mail, per tal de concertar la nova data d'examen.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Examen Parcial 1	47.5%	2	0,08	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8
Examen parcial 2	47.5%	2	0,08	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8
Lliurament d'exercicis	5%	0,2	0,01	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8

Bibliografia

El material del curs es trobarà en l'espai de l'assignatura del Campus Virtual de la UAB (<https://cv2008.uab.cat>). Entre aquest material es trobaran: informacions generals, transparències utilitzades a classe o de suport, vídeos de suport, exercicis a lliurar, exercicis de reforç (si es considera necessari), notes dels exàmens parcials i qualsevol altre informació que es consideri d'interès pels alumnes.

Bibliografia:

- “ H. Hart, D. Hart, L.E. Craine, *Química Orgánica* (9ª Ed.), McGraw Hill, 1995.
- “ G.H. Schmid. *Química Biológica*. Ed. Interamericana.1986.
- “ T. W. G. Solomons. *Organic Chemistry* (8a Ed.), John Wiley and Sons, New York, 2004.
- K. C. Timberlake. *Química. Una introducción a la Química General, Orgánica y Biológica* (10a Ed.), Pearson. Madrid, 2011.
- “ 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 Orgánica* (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 Orgánica*, EUNIBAR, 1987.