

Química orgànica

Codi: 102446
Crèdits: 8

| Titulació | Típus | Curs | Semestre |
|----------------------------|-------|------|----------|
| 2500897 Enginyeria Química | FB | 2 | A |

Professor de contacte

Nom: Joan Pau Bayón Rueda
Correu electrònic: Pau.Bayon@uab.cat

Utilització d'idiomes a l'assignatura

Llengua vehicular majoritària: català (cat)
Grup íntegre en anglès: No
Grup íntegre en català: No
Grup íntegre en espanyol: No

Equip docent

Antonio Campos Garcia
Laia Soler Bru
Ruben Solorzano Rodriguez
Gisela Cabre Segura
Jose Antonio Olivares Montia
Sergio Jurado Moreno

Prerequisits

Tot i que no hi ha prerequisits oficials, és convenient que l'estudiant repassi els conceptes generals adquirits al primer curs amb l'assignatura de Fonaments de Química. En especial, la part que fa referència a equilibri químic i àcid-base.

Objectius

L'objectiu de l'assignatura és conèixer els principals grups funcionals presents en la química orgànica, així com estudiar la seva reactivitat. Es pretén que l'estudiant sigui capaç d'identificar els graus d'oxidació i les funcionalitats i relacionar-les amb possibles precursors, així com distingir entre diferents tipus de reaccions.

Competències

- Aplicar coneixements rellevants de les ciències bàsiques, com són les matemàtiques, la química, la física i la biologia, i també principis d'economia, bioquímica, estadística i ciència de materials, per comprendre, descriure i resoldre problemes típics de l'enginyeria química.
- Hàbits de pensament
- Hàbits de treball personal

Resultats d'aprenentatge

1. Associar les propietats i la reactivitat de les principals famílies de compostos bioorgànics amb els grups funcionals que contenen.
2. Comprendre el concepte d'estereoisomeria i ser capaç d'identificar el tipus i el nombre d'estereoisòmers que presenta un determinat compost orgànic.
3. Comprendre els principis essencials de l'estabilitat i la reactivitat dels compostos orgànics.
4. Desenvolupar el pensament científic.
5. Desenvolupar estratègies d'aprenentatge autònom.
6. Identificar compostos orgànics simples a partir de les propietats espectroscòpiques i analítiques dels seus grups funcionals i relacionar les característiques estructurals amb les seves propietats fisicoquímiques.
7. Proposar rutes sintètiques eficaces per a la preparació de compostos orgànics simples i avaluar processos de síntesi de compostos orgànics simples a partir de criteris d'economia energètica i d'àtoms (química verda).
8. Ser capaç de classificar els compostos orgànics i reconèixer-ne la reactivitat a partir dels grups funcionals que presenten.

Continguts

1. Introducció. Conceptes bàsics en Química Orgànica

Enllaç químic. Estructures de Lewis i formes ressonants. Orbitals atòmics, orbitals híbrids i orbitals moleculars. Polaritat. Forces intermoleculars. Estructures i fórmules de les molècules orgàniques. Grau d'oxidació. Classificació dels compostos segons el grau d'oxidació i el seu grup funcional. Termodinàmica i equilibri. Cinètica i mecanismes de reacció: reaccions elementals i per etapes, coordinada i perfil de reacció, estat de transició, intermedis de reacció, catàlisi. Nomenclatura.

2. Estereoquímica

Quiralitat. Centre estereogènic. Nomenclatura R/S. Isomeria configuracional: enantiòmers i diastereòmers. Mescla racèmica. Forma meso. Projeccions de Fischer. Activitat òptica, puresa òptica. Molècules quirals i la seva importància biològica.

3. Alcans

Classes d'alcans: sèries homòlogues. Nomenclatura. Propietats físiques. Fonts d'obtenció d'alcans. Isomeria conformacional en alcans lineals i cíclics. Projeccions de Newman. Reaccions d'halogenació d'alcans: reaccions en cadena, reactivitat/selectivitat, procés homolític, procés heterolític.

4. Alquens i alquins

Nomenclatura. Isomeria cis-trans (Z/E). Propietats físiques. Fonts d'obtenció d'alquens: cracking de nafes. Obtenció d'alquens per eliminació. Reaccions d'hidrogenació. Reaccions d'addició. Isomerització d'alquens. Polimerització d'olefines. Reaccions d'oxidació. Obtenció d'alquins i reactivitat.

----- 1er Parcial -----

5. Compostos aromàtics

El benzè: estructura electrònica. Ressonància. Aromaticitat. Fonts d'obtenció: reforming de nafes. Reaccions

de substitució electròfila aromàtica ($S_{E}Ar$). Efectes dels substituents en les $SEAr$: reactivitat i orientació.
Alguns

compostos orgànics aromàtics d'interès industrial.

III. COMPOSTOS ORGÀNICS DE GRAU D'OXIDACIÓ 1

6. Halurs d'alquil, alcohols, èters, amines, tiols, tioèters

Estructura i nomenclatura. Reaccions de preparació. Nucleòfil i electròfil. Reaccions de substitució nucleòfila ($S_{N}1-S_{N}2$). Reaccions d'eliminació. Compostos halogenats d'interès industrial. Reaccions de deshidratació i d'oxidació d'alcohols. Èters lineals i èters cíclics. Estructura i nomenclatura, Basicitat i nucleofília de les amines. Reactivitat. Tiols i tioèters.

IV. COMPOSTOS ORGÀNICS DE GRAU D'OXIDACIÓ 2 I 3

7. Aldehids i cetones

Estructura i reactivitat del grup carbonil. Reaccions d'obtenció. Reaccions d'oxidació i de reducció. Reaccions d'addició nucleòfila. Acetals i hemiacetals. Carbohidrats. Bases de Schiff. Condensació aldòlica.

8. Àcids carboxílics i derivats

Estructura i caràcter àcid. Reaccions d'obtenció. Reaccions d'interconversió dels àcids carboxílics i els seus derivats: halurs d'àcid, anhídrids, èsters, amides. Aminoàcids, pèptids i proteïnes. Àcids carboxílics i derivats d'interès industrial: fibres sintètiques, lípids i greixos naturals.

----- 2on Parcial -----

Metodologia

D'acord amb el objectius de l'assignatura, l'alumne en el decurs de quadrimestre s'haurà de veure involucrat en un seguit d'activitats per a assolir els coneixements i competències establerts. Aquestes activitats es poden agrupar en tres tipologies diferents:

Classes magistrals: En aquest cas, els alumnes reben presencialment una sèrie de coneixements articulats exclusivament pel docent. Aquests coneixements científico-tècnics es pretén que serveixin de plataforma per a la posterior maduració per part dels alumnes. En qualsevol cas, es fomentarà la participació dels estudiants a través de la dinamització de les classes mitjançant la resolució de casos i preguntes de manera habitual.

Classes de problemes: En aquestes sessions, els alumnes posaran en pràctica, d'una manera dirigida, els coneixements adquirits a les classes magistrals i de les feines que es deriven d'aquestes. Es farà especial èmfasi en la participació activa dels alumnes a l'hora de resoldre els problemes que es vagin plantejant així com exercicis proposats. Aquest exercicis, en alguns casos, es plantejaran de manera que a través de les solucions proposades pels alumnes, es puguin avaluar els objectius a assolir.

Sessions de pràctiques: S'organitzaran sessions de practiques de laboratori relacionades amb el continguts de les classes magistrals i de les classes de problemes. L'assistència és obligatòria a totes les sessions- Abans de començar amb aquestes sessions caldrà que es revisin atentament les normes de seguretat per treballar en un laboratori químic. Els alumnes tindran penjada una còpia de les normes al Campus Virtual abans de començar les sessions. Des del primer dia caldrà portar bata, ulleres deseguretat i llibreta de laboratori.

Activitats formatives

| Títol | Hores | ECTS | Resultats d'aprenentatge |
|--|-------|------|--------------------------|
| Tipus: Dirigides | | | |
| Classes de problemes | 15 | 0,6 | |
| Classes magistrals | 30 | 1,2 | |
| Seminaris | 5 | 0,2 | |
| Sessions de laboratori | 35 | 1,4 | |
| Tipus: Supervisades | | | |
| Reunions entre el professor i grups de treball per explicar continguts, realitzar consultes i orientar | 14 | 0,56 | |
| Tipus: Autònomes | | | |
| Estudi i ampliació dels conceptes explicats a classe. | 60 | 2,4 | |
| Resolució de problemes | 30 | 1,2 | |

Avaluació

1. General

En aquesta assignatura, s'avaluen individualment els coneixements científico-tècnics de la matèria assolits per l'alumne, així com la seva capacitat d'anàlisi, síntesi i de raonament crític. La nota global de l'assignatura es calcularà en base a 3 notes cadascuna amb una contribució diferent:

Part 1: Nota de proves escrites, exàmens (**60%** de contribució al total del curs).

Part 2: Nota de proves escrites, problemes (**15%** de contribució al total del curs).

Part 3: Nota de pràctiques (**25%** de contribució al total del curs).

2. Parts en que es divideix l'avaluació global de l'assignatura

A continuació es detalla cadascuna de les parts:

2.1. Part 1: Nota de proves escrites, exàmens (60%):

2.1. Exàmens parcials (60%):

Dos exàmens parcials escrits: la matèria avaluada comprendrà tota aquella impartida fins a la data de l'examen. La nota obtinguda al 1er parcial contribueix un 30% i la del 2on un 30% ambdós sobre la nota global de l'assignatura.

2.2. Prova final (recuperació) (60%):

La matèria avaluada comprendrà tota aquella impartida durant el curs. Aquesta prova té dos finalitats:

a) Qualsevol, que no hagi superat el curs amb els exàmens parcials s'haurà de presentar per aprovar el curs. La nota que obtingui equivaldrà a la mitjana dels dos parcials i contribuirà un 60% a la nota final de l'assignatura.

b) Qualsevol alumne que hagi aprovat el curs per parcials es podrà presentar per pujar la nota de la Part 1. Es podrà presentar a l'examen i decidir al final del temps d'examen si entrega o no. En cas d'entregar, la nota que finalment comptarà com a Part 1 serà la de l'examen final. Si no entrega, la nota serà la obtinguda per mitjana dels parcials.

2.2. Part 2: Nota de proves escrites, problemes (15%):

Cada tema tindrà assignada una llista de problemes que els alumnes hauran de resoldre. Al llarg del curs es recolliran un determinat nombre d'aquests problemes que seran corregits i avaluats. El nombre de problemes a avaluar no està predeterminat i els alumnes no sabran prèviament quins problemes de tots els proposats seran avaluats. La correcció d'aquests problemes contribuirà amb el 15% a la nota final.

IMPORTANT: Tots els alumnes independentment de quantes vegades s'hagin matriculat de l'assignatura, hauran de tenir presentats un mínim del 80% del total dels problemes demanats. No presentar un problema es comptarà com 0,0 a l'hora de fer mitjana per a calcular la nota de la Part 2.

2.3. Part 3: Nota de pràctiques (25%):

Les sessions de pràctiques tindran un pes de 25% sobre la nota final de l'assignatura. Aquest percentatge es repartirà en: 10% d'actitud i resultats al laboratori, 15% d'un examen escrit que es farà al final de les sessions de laboratori. L'assistència a les sessions de laboratori és obligatòria i en cap cas pot ser inferior al 80% per poder aprovar l'assignatura. Qualsevol falta s'ha de justificar al professor responsable del laboratori. El no compliment de les normes de seguretat en el laboratori suposarà l'expulsió immediata del mateix i per tant, la pèrdua del dret a ser avaluat de les pràctiques amb el que no tindrà possibilitat d'aprovar l'assignatura.

3. Qualificació Global de l'Assignatura

Definim:

3.1. Alumne que SUPERA l'assignatura

3.1.1. Es consideraran alumnes que superen l'assignatura només aquells que:

a) Que hagin obtingut com a mínim 4 sobre 10 punts en cadascun dels exàmens parcials i a més tinguin un promig igual o superior a 5 punts sobre 10 (Part 1). Alternativament, en cas de presentar-se a l'examen final, la nota d'aquest sigui igual o superior a 5 sobre 10.

b) Que hagin presentat un mínim del 80% dels problemes demanats a classe de problemes (Part 2). En aquest apartat no hi ha una nota mínima.

c) Que tinguin una nota de pràctiques (Part 3) igual o superior a 5 sobre 10.

3.1.2. Matrícules d'Honor. Per a cada assignatura d'un mateix pla d'estudis, es concediran globalment les matrícules d'honor resultants de calcular el cinc per cent o fracció dels alumnes matriculats en **tots** els grups de docència de l'assignatura. Només es podran atorgar a estudiants que hagin obtingut una qualificació final igual o superior a 9.

3.1.3. MOLT IMPORTANT:

Als alumnes matriculats per segona vegada o més:

Si l'alumne ho desitja, no caldrà que realitzi les pràctiques i es comptabilitzarà la nota de pràctiques obtinguda al curs on les va realitzar. En qualsevol cas, si l'alumne vol repetir les pràctiques li serà aplicada la nota obtinguda al present curs.

3.2. Alumne que NO SUPERA l'assignatura

Qualsevol alumne que no compleixin qualsevol de les condicions esmentades a l'apartat 3.1. La nota que constarà al seu expedient serà la que resulti d'aplicar la ponderació entre les diferents Parts esmentades a l'apartat 2.

3.3. Alumne amb qualificació de NO AVALUABLE.

Es consideraran alumnes No Avaluables aquells que:

- Si estan matriculats per 1^a vegada: No hagin realitzat cap de les proves d'avaluació escrites (Part 1) ni les pràctiques.
- Si estan matriculats per 2^a vegada o més: No hagin realitzat cap de les proves d'avaluació escrites (Part 1).

4. IREGULARITATS:

Sense perjudici d'altres mesures disciplinàries que s'estimin oportunes, i d'acord amb la normativa acadèmica vigent, es qualificaran amb un zero les irregularitats comeses per l'estudiant que puguin conduir a una variació de la qualificació d'un acte d'avaluació. Per tant, copiar o deixar copiar una pràctica o qualsevol altra activitat d'avaluació implicarà suspendre-la amb un zero, i si és condició superar-la per aprovar, tota l'assignatura quedarà suspesa. No seran recuperables les activitats d'avaluació qualificades d'aquesta forma i per aquest procediment, i per tant l'assignatura serà suspesa directament sense oportunitat de recuperar-la en el mateix curs acadèmic.

5. Comunicació

L'eina principal de comunicació per a difondre els materials de l'assignatura, llistats de notes i notícies serà la plataforma virtual Moodle.

Activitats d'avaluació

| Títol | Pes | Hores | ECTS | Resultats d'aprenentatge |
|--------------------------|-----|-------|------|--------------------------|
| Entrega de problemes | 15% | 0 | 0 | 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 |
| Pràctiques de laboratori | 25% | 2 | 0,08 | 1, 3, 4, 5, 6, 8 |
| 1 prova recuperació | 60% | 3 | 0,12 | 1, 2, 3, 4, 6, 7, 8 |
| 2 proves parcials | 60% | 6 | 0,24 | 1, 2, 3, 4, 6, 7, 8 |

Bibliografia

P.Y. Bruice. Organic Chemistry (6th Ed.) Prentice-Hall International - Pearson Education, **2010**.

F.A. Carey. Organic Chemistry (8th Ed.) McGraw-Hill, **2011**.

T.W.G. Solomons. Organic Chemistry (9th Ed.), Wiley Publishing, New York, **2008**.

K.P.C. Vollhardt; N.E. Schore Química Orgánica. Estructura y Función (5^a Ed.), Omega, **2008**.

W.R. Peterson. Formulación y nomenclatura en Química Orgánica, EUNIBAR, **1987**.