

Estructura y Reactividad de los Compuestos Orgánicos

Código: 102528
Créditos ECTS: 12

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2502444 Química	OB	2	A

Contacto

Nombre: Rosa Maria Sebastián Pérez
Correo electrónico: RosaMaria.Sebastian@uab.cat

Uso de idiomas

Lengua vehicular mayoritaria: catalán (cat)
Algún grupo íntegramente en inglés: No
Algún grupo íntegramente en catalán: No
Algún grupo íntegramente en español: No

Equipo docente

Roser Pleixats Rovira
Joan Pau Bayón Rueda
Felix Busqué Sánchez

Prerequisitos

Es necesario tener aprobadas las asignaturas de Fundamentos de química y Experimentación y documentación en Química de primer curso del Grado de Química.

Objetivos y contextualización

El programa que se propone pretende dar una visión general de los compuestos orgánicos tanto desde el punto de vista estructural como de su reactividad. En líneas generales, la asignatura se organiza teniendo en cuenta la reactividad común y diferencial de los diversos grupos funcionales. También se trabajarán los aspectos estereoquímicos de las moléculas orgánicas.

Los objetivos concretos son:

1. Estudio del análisis conformacional y estereoquímica de las moléculas orgánicas.
2. Estudio de la estructura y reactividad de los principales grupos funcionales.
3. Estudio de metodologías sintéticas para la formación de enlaces carbono-carbono y de interconversión de grupos funcionales.
4. Introducción a los mecanismos de las reacciones orgánicas.
5. Aprendizaje de técnicas y procedimientos experimentales básicos de un laboratorio de Química Orgánica.

Competencias

- Adaptarse a nuevas situaciones
- Aplicar los conocimientos químicos a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa o cualitativa en ámbitos familiares y profesionales
- Aprender de forma autónoma
- Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa
- Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor
- Demostrar motivación por la calidad
- Demostrar que comprende los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales de las diferentes áreas de la Química
- Evaluar los riesgos sanitarios y el impacto ambiental y socioeconómico asociado a las sustancias químicas y la industria química
- Gestionar la organización y planificación de tareas
- Gestionar, analizar y sintetizar información
- Interpretar los datos obtenidos mediante medidas experimentales, incluyendo el uso de herramientas informáticas, identificar su significado y relacionarlos con las teorías químicas, físicas o biológicas apropiadas
- Manejar instrumentos y material estándares en laboratorios químicos de análisis y síntesis
- Manipular con seguridad los productos químicos
- Mantener un compromiso ético
- Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales
- Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos
- Poseer destreza para el cálculo numérico.
- Proponer ideas y soluciones creativas
- Razonar de forma crítica
- Reconocer y analizar problemas químicos y plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo en casos necesarios el uso de fuentes bibliográficas
- Resolver problemas y tomar decisiones
- Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo
- Utilizar correctamente la lengua inglesa en el ámbito de la Química
- Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información

Resultados de aprendizaje

1. Adaptarse a nuevas situaciones
2. Aplicar los contenidos teóricos adquiridos a la explicación de fenómenos experimentales
3. Aprender de forma autónoma
4. Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa
5. Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor
6. Demostrar motivación por la calidad
7. Describir las metodologías sintéticas más relevantes para la interconversión de grupos funcionales y la formación de enlaces carbono-carbono sencillos y múltiples
8. Describir los diferentes tipos de isomería en compuestos orgánicos
9. Describir los mecanismos de las principales reacciones orgánicas, así como los diversos factores que los afectan
10. Determinar y representar la configuración de los centros quirales en compuestos orgánicos
11. Evaluar resultados experimentales de forma crítica y deducir su significado
12. Gestionar la organización y planificación de tareas
13. Gestionar, analizar y sintetizar información
14. Identificar la reactividad básica asociada a los diversos grupos funcionales orgánicos
15. Identificar la relación de isomería entre diferentes estructuras de compuestos orgánicos
16. Identificar los grupos funcionales de los principales productos naturales orgánicos y sus reacciones más importantes
17. Identificar los riesgos en la manipulación de compuestos químicos orgánicos en el laboratorio, así como aplicar los protocolos adecuados para el almacenaje o eliminación de los residuos generados
18. Justificar los resultados obtenidos en el laboratorio para procesos de síntesis, separación, purificación y caracterización de compuestos orgánicos
19. Llevar a cabo procedimientos de síntesis, separación y purificación básicos en un laboratorio de Química Orgánica

20. Manipular correctamente el material de vidrio y otro tipo de materiales habituales en un laboratorio de Química Orgánica
21. Manipular reactivos químicos y compuestos orgánicos con seguridad
22. Mantener un compromiso ético
23. Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales
24. Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos
25. Poseer destreza para el cálculo numérico
26. Predecir la reactividad de los diversos grupos funcionales orgánicos ante determinadas condiciones de reacción, así como la estructura de los productos que se obtendrán
27. Proponer ideas y soluciones creativas
28. Proponer mecanismos de reacción en procesos en los que intervienen compuestos orgánicos
29. Proponer vías sintéticas sencillas para la obtención de determinados compuestos orgánicos a partir de ciertos reactivos
30. Razonar de forma crítica
31. Reconocer los nombres en lengua inglesa del material y los instrumentos básicos en un laboratorio de Química Orgánica
32. Resolver problemas de química orgánica con la ayuda de bibliografía complementaria proporcionada
33. Resolver problemas y tomar decisiones
34. Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo
35. Utilizar instrumentos básicos de caracterización de compuestos químicos orgánicos
36. Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información

Contenido

1. Análisis conformacional y estereoquímica

Introducción a los compuestos orgánicos. Isomería estructural o constitucional.

Isomería conformacional: representación mediante proyecciones de Newman y en perspectiva caballera.

Análisis conformacional de alcanos.

Cicloalcanos: tensión anular.

Análisis conformacional del ciclohexano. Equilibrio conformacional en ciclohexanos sustituidos.

Isomería configuracional *cis-trans* ciclánica.

Isomería configuracional *Z-E* de alquenos.

Enantioisomería y diastereoisomería. Quiralidad.

Isomería configuracional en compuestos con centros quirales: representación y nomenclatura *R/S*.

Actividad óptica: poder rotatorio y pureza óptica.

Isómeros configuracionales con más de un centro quiral: formas *meso*.

Mezclas racémicas. Resolución de racematos.

2. Reacciones de sustitución radicalaria

Halogenación de alcanos.

Energías de disociación de enlace, radicales libres y estabilidad relativa.

Reactividad *versus* selectividad en la halogenación de alcanos. Postulado de Hammond.

Sustitución radicalaria de hidrógenos alílicos, bencílicos y arílicos.

3. Substitución nucleófila sobre carbono saturado.

Reacciones S_N1 y S_N2 : mecanismo, cinética y estereoquímica.

Grupos salientes: haluros de alquilo, alcoholes y éteres. Efectos sobre la reactividad y la activación del nucleófilo.

Nucleófilos: acetiluro y cianuro, agua, alcoholes y tioles, amoníaco, aminas y imidas. Efecto sobre la reactividad.

Otros aspectos que influyen en la reactividad.

Competencia entre S_N1 y S_N2 .

4. Reacciones de eliminación

Reacciones E1 y E2 para la formación de enlaces múltiples carbono-carbono: mecanismo y cinética.

Grupos salientes, substratos y bases en reacciones E1 y E2. Deshidratación de alcoholes.

Regioselectividad en reacciones E1 y E2. Regla de Zaitsev y estabilidad de alquenos.

Estereoquímica de las reacciones E1 y E2.

Competencia entre S_N1 , S_N2 , E1 y E2.

Oxidación de alcoholes.

5. Adición a enlaces múltiples carbono-carbono

Adición electrófila a alquenos y alquinos: mecanismo general.

Adición de haluros de hidrógeno a alquenos. Intermedios catiónicos. Regla de Markovnikov.

Adición de agua y alcoholes a alquenos. Transposiciones de carbocationes.

Oximercuriación-desmercuriación e hidrobtoración.

Adición de halógenos a alquenos.

Adición de hidrógeno a alquenos.

Polimerización de alquenos.

Reacciones de adición a alquinos.

Dienos conjugados, aislados y acumulados. Estabilidad relativa.

Adición electrófila a dienos conjugados: adición 1,2 vs adición 1,4; control cinético vs control termodinámico.

6. Adición nucleófila al grupo carbonilo

Reactividad del grupo carbonilo. Mecanismos de adición nucleófila.

Adición de nucleófilos de carbono: cianuro, acetiluros y compuestos organometálicos.

Adición de nucleófilos de nitrógeno.

Adición de nucleófilos de oxígeno.

Adición de nucleófilos de azufre.

Adición de hidruros: reducción de aldehídos y cetonas.

7. Substitución nucleófila en el grupo acilo.

Reacciones de transferencia de acilo de ácidos carboxílicos y derivados: mecanismo de adición-eliminación y efecto del grupo saliente y del nucleófilo. Reacciones de interconversión: formación e hidrólisis de derivados de ácido carboxílico.

Reducción de ácidos y derivados.

Reacciones con compuestos organometálicos.

Derivados de ácido fosfórico.

Polímeros de condensación: grupos funcionales de 4º grado de oxidación.

8. Reactividad del carbono en sistemas carbonílicos

Acidez de los hidrógenos del carbono en . Efecto sobre la reactividad.

Tautomería ceto-enólica.

Halogenación de aldehídos y cetonas.

Halogenación de ácidos carboxílicos.

Formación de productos carbonílicos , β -insaturados: condensación aldólica.

Reacción de Cannizzaro.

Formación de productos β -dicarbonílicos: condensaciones de Claisen y de Dieckmann.

Compuestos β -dicarbonílicos: síntesis acetoacética y malónica.

9. Reacciones de sustitución en compuestos aromáticos.

Compuestos aromáticos: benceno, policíclicos y heterocíclicos.

Reacción con electrófilos: sustitución electrófila aromática (S_EAr).

S_EAr en el benceno: nitración, sulfonación, halogenación, acilación de Friedel-Crafts y alquilación de Friedel-Crafts.

S_EAr en bencenos sustituidos: efecto sobre la reactividad y la orientación.

Sales de diazonio. Reacciones de copulación.

Reacción con nucleófilos. Substitución nucleófila aromática (S_NAr), mecanismo de adición-eliminación.

Bencenos sustituidos a partir de sales de diazonio.

Reacciones de sustitución en compuestos aromáticos heterocíclicos.

Metodología

De acuerdo con los objetivos de la asignatura, el alumnado a lo largo del año se deberá involucrar en un conjunto de actividades para alcanzar los conocimientos y competencias establecidas. Estas actividades se pueden agrupar en tres tipologías diferentes:

Clases magistrales: En este caso, el alumnado recibe presencialmente una serie de conocimientos articulados exclusivamente por el docente. Estos conocimientos científico-técnicos se pretende que sirvan de plataforma para la posterior maduración por parte del alumnado. En cualquier caso, se fomentará la participación del estudiantado a través de la dinamización de las clases mediante la resolución de casos y preguntas de manera habitual.

Clases de problemas: En estas sesiones se discutirán las soluciones propuestas por el alumnado, a partir del trabajo autónomo desarrollado de forma individual o en grupo, para ejercicios y problemas planteados previamente. Se hará especial énfasis en la participación activa del alumnado.

Seminarios: Se realizarán tres seminarios a lo largo del curso cerca de los exámenes parciales. Estas horas se utilizarán para resolver dudas sobre el examen o avanzara en problemas que hayan quedado sin resolver. El alumnado también podrá proponer problemas a resolver.

Prácticas de laboratorio: Se realizarán sesiones de 4 horas de laboratorio con el fin de aprender las técnicas básicas de un laboratorio de síntesis orgánica. Los contenidos de estas sesiones estarán vinculados a los temas tratados en el periodo de clases teóricas previo. Se realizará una sesión teórica de introducción a las prácticas que será obligatoria (1h).

Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases de problemas	20	0,8	1, 3, 4, 8, 9, 7, 10, 13, 16, 14, 15, 24, 26, 27, 28, 29, 30, 33, 25, 34, 36
Clases de teoría	56	2,24	1, 3, 4, 8, 9, 7, 10, 13, 16, 14, 15, 22, 23, 24, 26, 28, 29, 30
Prácticas de laboratorio	48	1,92	1, 3, 4, 5, 6, 19, 12, 13, 16, 17, 14, 15, 18, 20, 21, 23, 24, 26, 27, 30, 31, 33, 25, 34, 35
Seminarios	3	0,12	2, 11, 4, 8, 9, 7, 10, 12, 13, 16, 14, 15, 26, 28, 29, 32, 33
Tipo: Autónomas			
Estudio, resolución de problemas, preparación de prácticas	161	6,44	

Evaluación

Exámenes (75% de la nota final): En los exámenes se evaluarán los conocimientos contenidos en el programa de la asignatura, con especial énfasis en la capacidad de resolución de problemas.

Se realizarán tres exámenes parciales de una duración máxima de tres horas. Cada uno tendrá el mismo peso específico en el total de la nota final de los exámenes, tendrá un valor del 25%. Para hacer media entre ellos se debe alcanzar una calificación mínima de 4 puntos sobre 10 en cada uno de los parciales.

Prácticas de laboratorio (15% de la nota final): Se valorará el interés, la habilidad experimental y los resultados obtenidos (40%), así como el examen de prácticas (60%). Las sesiones de prácticas son obligatorias. Para hacer la media se debe tener una calificación mínima de 5 puntos sobre 10 en el examen de prácticas.

ADVERTENCIA SOBRE SEGURIDAD EN EL LABORATORIO: La persona que se vea involucrada en un incidente que pueda tener consecuencias graves de seguridad podrá ser expulsada del laboratorio y suspendida la asignatura.

Aquel alumnado matriculado por 2ª vez o más, que en el curso anterior realizara las prácticas de laboratorio y obtuviera una nota igual o superior a 5 puntos sobre 10 podrá no repetir las y se le mantendrá la nota del curso anterior.

Otras evidencias (10%): A lo largo del curso se pueden plantear ejercicios u otros pequeños trabajos para realizar de forma individual o en grupo, en clase o fuera de ella según el criterio del profesorado. Los trabajos no presentados computaran con un 0.0 sobre 10 a la hora de calcular la media.

Para aprobar la asignatura por curso es necesario:

a) Haber obtenido una nota media de los tres exámenes parciales de 5 puntos sobre 10 o superior y una calificación mínima de 4 puntos en cada uno de los parciales. No se compensarán haciendo media las notas inferiores.

b) Haber realizado todas las sesiones de prácticas y obtenido una nota mínima de 5 puntos sobre 10 y una calificación mínima de 5 puntos en el examen de prácticas. No se compensarán haciendo media las notas inferiores.

c) Obtener una media global de todos los aspectos evaluables de 5 puntos sobre 10.

Recuperación

Habrán un único **examen de recuperación** para todo el alumnado que no hayan aprobado por curso o aquel que quiera subir nota. El alumnado que haga el examen para subir nota tendrá como nota final del examen la que haya obtenido en el examen de recuperación.

Para participar en el examen de recuperación el alumnado debe de haber estado previamente evaluado en un conjunto de actividades cuyo peso equivalga a un mínimo de dos terceras partes de la calificación de toda la asignatura.

Este examen incluirá materia de todo el curso. Además, este examen incluirá unas preguntas para el alumnado que no hayan aprobado el examen de prácticas que se valorarán a parte. Para hacer media con la otra nota de prácticas de laboratorio el alumnado deberá obtener una nota mínima de 5 puntos sobre 10 en esta parte del examen.

El alumnado que no haya aprobado por curso deberá obtener una calificación mínima de 5 puntos sobre 10 en el examen de recuperación y una media de todos los aspectos evaluables de 5 puntos sobre 10.

Se considerará alumnado **NO EVALUABLE** aquel que:

a) Si está matriculado por 1ª vez: No haya realizado ninguno de los exámenes parciales ni las prácticas de laboratorio.

b) Si está matriculado por 2ª vez o más y tiene las prácticas aprobadas: No hayan realizado ninguno de los exámenes parciales.

AVISO IMPORTANTE: Al alumnado que en algún examen se le vea copiando, se le retirará el examen y tendrá un 0 como nota de la prueba correspondiente.

Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
--------	------	-------	------	---------------------------

Exámenes parciales y recuperación	75%	10	0,4	2, 11, 4, 8, 9, 7, 10, 16, 17, 14, 15, 18, 21, 22, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 33
Otras evidencias	10%	0	0	3, 4, 8, 9, 7, 10, 13, 16, 14, 15, 24, 26, 27, 28, 29, 30, 32, 33, 34, 36
Seguimiento de las prácticas de laboratorio	15%	2	0,08	1, 2, 3, 11, 4, 5, 6, 19, 12, 13, 17, 18, 20, 21, 22, 23, 24, 27, 30, 31, 32, 33, 25, 34, 35, 36

Bibliografía

Libros de texto:

Organizado por reactividad: Joseph M. Hornback, *Organic Chemistry*, Ed. Thomson Brooks/Cole, 2006

Organizado por grupos funcionales: K.P.C. Vollhardt; N.E. Schore, *Organic Chemistry: Structure and Function (8th Ed)*, Ed. McMillan Learning 2018; K.P.C. Vollhardt; N.E. Schore., *Organic Chemistry (6th Ed.)*, Ed. Freeman, WH & Company, 2009; K.P.C. Vollhardt; N.E. Schore, *Química Orgánica. Estructura y Función (5^a Ed.)*, Ed. Omega, 2008.

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

Enlaces web:

Diccionario de Terminología Química: <http://goldbook.iupac.org/>

Nomenclatura y Estructuras: <http://www.freechemsketch.com/>

ChemDraw: <http://sitelicense.cambridgesoft.com/sitelicense.cfm?sid=1111>; adreça: xxx@e-campus.uab.es

Espacio virtual de la asignatura: [Moodle](#)

Organic Chemistry Portal: www.organic-chemistry.org