

Estructura i Reactivitat dels Composts Orgànics

Codi: 102528

Crèdits: 12

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OB	2	A

Professor/a de contacte

Nom: Rosa Maria Sebastián Pérez

Correu electrònic: RosaMaria.Sebastian@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

Roser Pleixats Rovira

Joan Pau Bayón Rueda

Felix Busqué Sánchez

Prerequisits

Cal tenir aprovades les assignatures *Fonaments de Química i Experimentació* i *Documentació en Química* de 1er curs del Grau de Química.

Objectius

El programa que es proposa pretén donar una visió general dels compostos orgànics tant des del punt de vista estructural com de la seva reactivitat. En línies generals, l'assignatura s'organitza atenent a la reactivitat comuna i diferencial dels diversos grups funcionals. També es treballaran els aspectes estereoquímics de les molècules orgàniques.

Els objectius concrets són:

1. Estudi de l'anàlisi conformacional i estereoquímica de les molècules orgàniques
2. Estudi de l'estructura i reactivitat dels principals grups funcionals
3. Estudi de metodologies sintètiques per la formació d'enllaços carboni-carboni i d'interconversió de grups funcionals
4. Introducció als mecanismes de les reaccions orgàniques
5. Apreneatge de tècniques i procediments experimentals bàsics d'un laboratori de Química Orgànica

Competències

- "Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques; identificar-ne el significat i relacionar les dades amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades."
- Adaptar-se a noves situacions.

- Aplicar els coneixements químics a la resolució de problemes de naturalesa quantitativa o qualitativa en àmbits familiars i professionals.
- Aprendre de manera autònoma.
- Avaluar els riscos sanitaris i l'impacte ambiental i socioeconòmic associat a les substàncies químiques i a la indústria química.
- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
- Demostrar motivació per la qualitat.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, els principis, les teories i els fets fonamentals de les diferents àrees de la química.
- Emprar correctament la llengua anglesa en l'àmbit de la química.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
- Manejar instruments i material estàndard en laboratoris químics d'anàlisi i síntesi.
- Manipular amb seguretat els productes químics.
- Mantenir un compromís ètic.
- Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
- Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer i analitzar problemes químics i plantejar respostes o treballs adequats per a resoldre'ls.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Tenir destresa per al càlcul numèric.
- Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
- Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Resultats d'aprenentatge

1. Adaptar-se a noves situacions.
2. Aplicar els continguts teòrics adquirits a l'explicació de fenòmens experimentals.
3. Aprendre de manera autònoma.
4. Avaluar els resultats experimentals de manera crítica i deduir-ne el significat.
5. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
6. Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
7. Demostrar motivació per la qualitat.
8. Descriure els diferents tipus d'isomeria en compostos orgànics.
9. Descriure els mecanismes de les principals reaccions orgàniques, així com els diversos factors que els afecten.
10. Descriure les metodologies sintètiques més rellevants per a la interconversió de grups funcionals i la formació d'enllaços carboni-carboni senzills i múltiples.
11. Determinar i representar la configuració dels centres quirals en compostos orgànics.
12. Dur a terme procediments de síntesi, separació i purificació bàsics en un laboratori de química orgànica.
13. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
14. Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
15. Identificar els grups funcionals dels principals productes naturals orgànics i les seves reaccions més importants.
16. Identificar els riscos en la manipulació de compostos químics orgànics al laboratori, així com aplicar els protocols adequats per a l'emmagatzematge o eliminació dels residus generats.
17. Identificar la reactivitat bàsica associada als diversos grups funcionals orgànics.
18. Identificar la relació d'isomeria entre diferents estructures de compostos orgànics.
19. Justificar els resultats obtinguts al laboratori per a processos de síntesi, separació, purificació i caracterització de compostos orgànics.
20. Manipular correctament el material de vidre i altres tipus de materials habituals en un laboratori de química orgànica.
21. Manipular reactius químics i compostos orgànics amb seguretat.
22. Mantenir un compromís ètic.
23. Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.

24. Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
25. Predir la reactivitat dels diversos grups funcionals orgànics davant de determinades condicions de reacció, així com l'estructura dels productes que s'hi obtindran.
26. Proposar idees i solucions creatives.
27. Proposar mecanismes de reacció en processos en què intervenen compostos orgànics.
28. Proposar vies sintètiques senzilles per a l'obtenció de determinats compostos orgànics a partir de certs reactius.
29. Raonar de forma crítica.
30. Reconèixer els noms en llengua anglesa del material i els instruments bàsics en un laboratori de química orgànica.
31. Resoldre problemes de química orgànica amb l'ajuda de bibliografia complementària proporcionada.
32. Resoldre problemes i prendre decisions.
33. Tenir destresa per al càlcul numèric.
34. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
35. Utilitzar instruments bàsics de caracterització de compostos químics orgànics.
36. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Continguts

1. Anàlisi conformacional i estereoquímica

Introducció als compostos orgànics. Isomeria estructural o constitucional.

Isomeria conformacional: representació mitjançant projeccions de Newman i en perspectiva de cavallet.

Anàlisi conformacional d'alcans.

Cicloalcans: tensió anular.

Anàlisi conformacional del ciclohexà. Equilibri conformacional en ciclohexans substituïts.

Isomeria configuracional *cis-trans* ciclànica.

Isomeria configuracional *Z-E* d'alquens.

Enantioisomeria i diastereoisomeria. Quiralitat.

Isomeria configuracional en compostos amb centres estereogènics: representació i nomenclatura *R/S*.

Activitat òptica: poder rotatori i puresa òptica.

Isòmers configuracionals amb més d'un centre estereogènic: formes meso.

Mescles racèmiques. Resolució de racemats.

2. Reaccions de substitució radicalària

Halogenació d'alcans.

Energies de dissociació d'enllaç, radicals lliures i estabilitat relativa.

Reactivitat vs selectivitat en l'halogenació d'alcans. Postulat de Hammond.

Substitució radicalària d'hidrògens al·lílics, benzílics i arílics.

3. Substitució nucleòfila sobre carboni saturat

Reaccions S_N1 i S_N2 : mecanismes i estereoquímica.

Grups sortints. Halurs d'alquil, alcohols i èters. Efecte sobre la reactivitat i activació del nucleòfug.

Nucleòfils: acetilur i cianur; aigua, alcohols i tiols; amoníac, amines i imides. Efecte sobre la reactivitat.

Altres aspectes que influeixen en la reactivitat.

Competència entre S_N1 i S_N2 .

4. Reaccions d'eliminació

Reaccions E1 i E2 per a la formació d'enllaços múltiples carboni-carboni: mecanismes

Grups sortints, substrats i bases en reaccions E1 i E2. Deshidratació d'alcohols.

Regioselectivitat en reaccions E1 i E2. Regla de Zaitsev i estabilitat d'alquens.

Estereoquímica de les reaccions E1 i E2.

Competència entre S_N1 , S_N2 , E1 i E2.

Oxidació d'alcohols.

5. Addició a enllaços múltiples carboni-carboni

Addició electròfila a alquens i alquins: mecanisme general.

Addició d'halurs d'hidrogen a alquens. Intermedis catiónics. Regla de Markovnikov.

Addició d'aigua i alcohols a alquens. Transposicions de carbocations.

Oximercuració-desmercuració i hidroboració.

Addició d'halògens a alquens.

Addició d'hidrogen a alquens.

Polimerització d'alquens.

Reaccions d'addició a alquins.

Diens conjugats, aïllats i acumulats. Estabilitat relativa.

Addició electròfila a diens conjugats: addició 1,2 vs addició 1,4; control cinètic vs control termodinàmic.

6. Addició nucleòfila al grup carbonil

Reactivitat del grup carbonil. Mecanismes d'addició nucleòfila.

Addició de nucleòfils de carboni: cianur, acetilurs i compostos organometàl·lics.

Addició de nucleòfils de nitrogen.

Addició de nucleòfils d'oxigen.

Addició de nucleòfils de sofre.

Addició d'hidrurs: reducció d'aldehids i cetones.

7. Substitució nucleòfila en el grup acil

Reaccions de transferència d'acil d'àcids carboxílics i derivats: mecanisme d'addició-eliminació i efecte del grup sortint i del nucleòfil. Reaccions d'interconversió: formació i hidròlisi de derivats d'àcid carboxílic.

Reducció d'àcids i derivats.

Reaccions amb compostos organometàl·lics.

Derivats de l'àcid fosfòric.

Polímers de condensació: grups funcionals de 4rt grau d'oxidació.

8. Reactivitat del carboni lfa en sistemes carbonílics

Acidesa dels hidrogens del carboni en alfa. Efecte sobre la reactivitat.

Tautomeria ceto-enòlica.

Alfa-halogenació d'aldehids i cetones. Alfa-halogenació d'àcids carboxílics.

Formació de productes carbonílics alfa,beta-insaturats: condensació aldòlica.

Reacció de Cannizzaro.

Formació de productes beta-dicarbonílics: condensacions de Claisen i de Dieckmann.

Compostos beta-dicarbonílics: síntesi acetoacètica i malònica.

9. Reaccions de substitució en compostos aromàtics

Compostos aromàtics: benzè, policíclics i heterocíclics.

Reacció ambelectròfils: substitució electròfila aromàtica (S_EAr).

S_EAr en el benzè: nitració, sulfonació, halogenació, acilació de Friedel-Crafts i alquilació de Friedel-Crafts.

S_EAr en benzens substituïts: efecte sobre la reactivitat i l'orientació.

Sals de diazoni. Reaccions de copulació.

Reacció amb nucleòfils: substitució nucleòfila aromàtica (S_NAr), mecanisme de addició-eliminació.

Benzens substituïts a partir de sals de diazoni.

Reaccions de substitució en compostos aromàtics heterocíclics.

Metodologia

D'acord amb el objectius de l'assignatura, l'alumnat en el decurs de l'any 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, l'alumnat reb 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 de l'alumnat. En qualsevol cas, es fomentarà la participació de l'estudiantat a través de la dinamització de les classes mitjançant la resolució de casos i preguntes de manera habitual.

Classes de problemes: En aquestes sessions es discutiran les solucions proposades per l'alumnat, a partir del treball autònom desenvolupat de forma individual o en grup, per a exercicis i problemes plantejats prèviament. Es farà especial èmfasi en la participació activa de l'alumnat.

Seminaris: Es faran tres seminaris al llarg del curs aprop dels exàmens parcials. Aquestes hores s'utilitzaran per resoldre dubtes sobre l'examen o avançar en problemes que hagin quedat sense resoldre. L'alumnat també podrà proposar problemes per resoldre.

Pràctiques de laboratori: Es realitzaran 12 sessions de 4 h de laboratori per tal d'aprendre les tècniques bàsiques d'un laboratori de síntesi orgànica. Els continguts d'aquestes sessions aniran vinculats als tèmics tractats en el període de classes teòriques previ. Es realitzarà una sessió teòrica d'introducció a les pràctiques que serà obligatòria (1h).

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de problemes	20	0,8	1, 3, 5, 8, 9, 10, 11, 14, 15, 17, 18, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 32, 33, 34, 36
Classes de teoria	56	2,24	1, 3, 5, 8, 9, 10, 11, 14, 15, 17, 18, 22, 23, 24, 25, 27, 28, 29
Pràctiques de laboratori	48	1,92	1, 3, 5, 6, 7, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 23, 24, 25, 26, 29, 30, 32, 33, 34, 35
Seminaris	3	0,12	2, 4, 5, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 17, 18, 25, 27, 28, 31, 32
Tipus: Autònomes			
Estudi, resolució de problemes, preparació de pràctiques	161	6,44	

Avaluació

Exàmens (69 % de la nota final): Als exàmens s'avaluaran els coneixements continguts en el programa de l'assignatura, amb especial èmfasi en la capacitat de resolució de problemes.

Es realitzaran tres exàmens parcials d'una durada màxima de tres hores. Cadascun tindrà el mateix pes específic sobre el total de la nota final dels exàmens, compta un 23%. Per fer mitjana per aprovar l'assignatura per parcials s'ha de tenir una qualificació mínima de 4 punts sobre 10 en cadascun dels parcials. Per presentar-se a l'examen de recuperació és obligatori presentar-se als tres exàmens parcials.

Pràctiques de laboratori (21 % de la nota final): Es valorarà l'interès, l'habilitat experimental i els resultats (40%), així com l'examen de pràctiques (60%). Les sessions de pràctiques son obligatòries. Es podrà faltar com a màxim a dues sessions en cas d'enfermetat justificada mèdicament. Per fer mitjana s'ha de tenir una qualificació mínima de 5 punts sobre 10 a l'examen de pràctiques.

ADVERTIMENT SOBRE SEGURETAT EN EL LABORATORI: La persona que es vegi involucrada en un incident que pugui tenir conseqüències greus de seguretat podrà ser expulsat del laboratori i suspendre l'assignatura.

L'alumnat matriculat per 2^a vegada o més, que en un curs anterior realitzés les pràctiques de laboratori i obtingués una nota igual o superior a 5 punts sobre 10 podrà no repetir-les i se li mantindrà la nota del curs anterior.

L'alumnat matriculat per 2^a vegada o més, que en un curs anterior realitzés la teoria i obtingués una nota igual o superior a 5 punts sobre 10 podrà no repetir-la i se li mantindrà la nota del curs anterior.

Altres evidències (10%): Al llarg del curs es poden plantejar exercicis o altres petits treballs per a realitzar de forma individual o en grup, a classe o fora de classe a criteri del professorat. Els treballs no presentats computaran amb un 0.0 sobre 10 a l'hora de calcular la mitjana.

Per aprovar l'assignatura per curs cal:

- a) Haver obtingut una nota mitjana dels tres exàmens parcials de 5 punts sobre 10 o superior i una qualificació mínima de 4 punts en cadascun dels parcials. No es compensaran fent la mitjana les notes inferiors.
- b) Haver realitzat totes les sessions de pràctiques i obtingut una nota mínima de 5 punts sobre 10 i una qualificació mínima de 5 punts en l'examen de pràctiques. No es compensaran fent la mitjana les notes inferiors.
- c) Obtenir una mitjana global de tots els aspectes avaluable de 5 punts sobre 10.

Recuperació:

Hi haurà un únic examen de recuperació per a tot l'alumnat que no hagi aprovat per curs o aquell que vulgui pujar nota. L'alumnat que faci l'examen per pujar nota tindrà com a nota final aquella que surti de ponderar les notes segons els criteris de la recuperació (veure abaix). Si l'alumne pren la decisió de presentar-se a pujar nota, haurà d'avisar prèviament al professorat.

Per participar a l'examen de recuperació de la part teòrica, l'alumnat ha d'haver-se presentat als tres exàmens parcials de l'assignatura.

Aquest examen inclourà matèria de tot el curs. A més, aquest examen inclourà unes preguntes per l'alumnat que no hagi aprovat l'examen de pràctiques que es valorarà a part. Per fer mitjana amb l'altra nota de pràctiques de laboratori l'alumnat haurà d'obtenir una nota mínima de 5 punts sobre 10 d'aquesta part de l'examen. No es podrà presentar cap alumne a pujar nota a l'exàmen de pràctiques.

L'alumnat que no hagi aprovat per curs haurà d'obtenir una qualificació mínima de 5 punts sobre 10 en l'examen de recuperació, així com el que vingui a pujar nota. La nota final de l'assignatura si s'ha participat en l'examen de recuperació (o per pujar nota) constarà de quatre parts: 59 % nota de l'exàmen de recuperació, 10 % la mitjana de la nota d'exàmens parcials, 10 % avaluació continuada i 21 % nota final de pràctiques de laboratori, i ha de ser 5 punts o més sobre 10.

Es considerarà alumnat NO AVALUABLE aquell que:

- a) Si estant matriculat per 1^a vegada: No hagi realitzat cap dels exàmens parcials ni les pràctiques.
- b) Si estant matriculat per 2^a vegada o més i tenint les pràctiques aprovades: No hagi realitzat cap dels exàmens parcials ni les pràctiques.
- c) Si estant matriculat per 2^a vegada o més i tenint la teoria aprovada: No hagi realitzat cap examen parcial ni les pràctiques.

AVIS IMPORTANT: L'alumnat que en algun examen dels realitzats durant l'avaluació continuada se li trobi copiant se li retirarà l'examen i tindrà un 0 com a nota de la prova corresponent.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Altres evidències	10%	0	0	3, 5, 8, 9, 10, 11, 14, 15, 17, 18, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 31, 32, 34, 36
Exàmens parcials i recuperació	69%	10	0,4	2, 4, 5, 8, 9, 10, 11, 15, 16, 17, 18, 19, 21, 22, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 32

Seguiment de les pràctiques de laboratori	21%	2	0,08	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 12, 13, 14, 16, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 26, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36
-------------------------------------------	-----	---	------	-------------------------------------------------------------------------------------------------

Bibliografia

Libres de text:

Organitzat per reactivitat: Joseph M. Hornback, *Organic Chemistry*, Ed. Thomson Brooks/Cole, 2006

Organitzat per grups funcionals: 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.; P. Y. Bruice, *Organic Chemistry, (8th Ed.)*; University of California, Santa Barbara, Pearson, 2017.

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

Enllaços web:

Diccionari de Terminologia Química: <http://goldbook.iupac.org/>

Nomenclatura i Estructures: <http://www.freechemsketch.com/>

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

Organic Chemistry Portal: www.organic-chemistry.org

Espai virtual de l'assignatura: [Moodle](#)

Guies docents:

<https://www.uab.cat/web/estudiar/llistat-de-graus/pla-d-estudis/guies-docents/x-1345467811508.html?param1=1>