

Química orgànica

Codi: 102446

Crèdits: 8

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2500897 Enginyeria Química	FB	2	A

Professor/a de contacte

Nom: Joan Pau Bayon 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

Prerequisits

És molt 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.

Són necessaris un coneixements mínims de formulació i nomenclatura orgànica.

Recordem que és una assignatura on part de l'avaluació es pot dur a terme en horari de classes (teòria i/o problemes). Per aquest motiu, és altament recomenable a l'hora de matricular-se, tenir en compte possibles solpaments amb activitats programades d'altres assignatures.

Objectius

Que l'estudiant sigui capaç d'identificar els principals grups funcionals i els seus graus d'oxidació corresponents.

Que l'estudiant adquireixi un coneixement estructurals bàsic de les molècules orgàniques i d'estereoquímica orgànica.

Que l'estudiant identifiqui els possibles precursors sintètics dels principals grups funcionals així com que tingui un coneixement bàsic de la reactivitat d'aquests.

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 Orgànica. Àcids i Bases en Química Orgànica.

2. Estereoquímica

Isomeria. Quiralitat. Centre estereogènic. Nomenclatura *R/S*. Enantiòmers i diastereòmers. Mescla racèmica. Forma meso. Projeccions de Fischer. Activitat òptica, puresa òptica. Isomeria d'alquens *cis-trans (Z/E)*. Molècules quirals i la seva importància biològica.

3. Alcans

Classes d'alcans: sèries homòlogues. Propietats físiques. Fonts d'obtenció d'alcans, petroli destil·lació fraccionada. Reaccions d'halogenació d'alcans: Trencament d'enllaç homolític i heterolític, reaccions en cadena i reactivitat/selectivitat.

4. Alquens i alquins

Propietats físiques. Fonts d'obtenció d'alquens: cracking de naftes. Obtenció d'alquens per eliminació. Reaccions d'hidrogenació d'alquens. Reaccions d'addició a alquens. Isomerització d'alquens. Polimerització d'alquens. Reaccions d'oxidació d'alquens. Reactivitat general d'alquins.

5. Compostos aromàtics

El benzè: estructura electrònica. Ressonància. Criteris d'aromaticitat. Reaccions de substitució electròfila aromàtica (S_EAr): Efectes dels substituents en les S_EAr , reactivitat i orientació.

6. Compostos amb Grau d'oxidació= 1:

Halurs d'alquil, alcohols, èters, amines, tiols, tioèters. Conceptes: Nucleòfil i electròfil. Reaccions de substitució nucleòfila (mecanismes S_N1-S_N2). Reaccions d'eliminació (mecanismes $E1-E2$). Basicitat i nucleofília de les amines.

7. Compostos amb Grau d'oxidació= 2:

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. Compostos amb Grau d'oxidació= 3 i 4:

Àcids carboxílics i derivats. Uretans i carbamats. 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. Uretans i carbamats.

Metodologia

D'acord amb els 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 objectius 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. En alguns casos, es podrà plantejar als alumnes breus qüestions amb les que pugui avaluar els objectius a assolir.

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.

Seminaris: Al llarg del curs es disposarà d'unes sessions dedicades a aclarir dubtes i/o correcció de proves d'avaluació.

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.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes Teòriques	30	1,2	1, 2, 3, 4, 8
Classes de problemes	15	0,6	1, 2, 3, 4, 6, 7, 8
Seminaris	5	0,2	1, 2, 3, 4, 6, 8
Sessions de laboratori	35	1,4	1, 3, 4, 6, 8
Tipus: Autònomes			
Estudi i ampliació dels conceptes explicats a classe.	74	2,96	1, 2, 3, 4, 5, 6, 8
Resolució de problemes	30	1,2	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8

Avaluació

1. General

A continuació es mostra la normativa d'avaluació. A més, el primer dia de classe (Teoria) es realitzarà una explicació sobre el funcionament de l'assignatura on es farà èmfasi en l'avaluació de l'assignatura.

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: Exàmens (60% de contribució al total del curs).

Part 2: Exercicis (15% de contribució al total del curs).

Part 3: Pràctiques (25% de contribució al total del curs).

A continuació es detalla cadascuna de les parts:

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

2.1. Part 1: Exàmens (60%):

2.1.1. Exàmens parcials (60%):

Dos exàmens parcials escrits: La matèria avaluada comprendrà tota aquella impartida des de l'inici de curs o des de després del 1er parcial, fins a la data de la prova al primer i segon parcials, respectivament. La nota obtinguda al 1er parcial contribueix un 30% i la del 2on un 30% ambdós sobre la nota global de l'assignatura.

2.2.2. 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 (Exàmens). 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: Exercicis (15%):

Al llarg del curs es proposaran i recolliran un determinat nombre de qüestions breus, de resposta ràpida. Aquests exercicis es podran proposar tant a classes de Teoria com de resolució de Problemes. El nombre de qüestions a avaluar no està predeterminat. La nota d'aquestes proves contribuirà amb el 15% a la nota final.

No presentar un d'aquest exercicis es comptarà com 0,0 punts 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 del 25% sobre la nota final de l'assignatura. Aquest percentatge es repartirà en: 10% d'actitud i resultats al laboratori (aquesta nota no serà recuperable), 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 compleixin els següents 2 apartats a i b:

a) Que hagin obtingut com a mínim 4 sobre 10 punts en cadascun dels exàmens parcials i a més tinguin una mitjana 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 tinguin una nota de pràctiques (Part 3) igual o superior a 5 sobre 10. La nota de l'examen escrit de pràctiques ha de ser com a mínim de 4.

No hi ha una nota mínima respecte a la Part 2 (exercicis realitzats a classe) la nota que resulti mitjana del sumatori de les notes dels exercicis presentats respecte al total dels exercicis proposats al llarg del curs, serà aplicada contribuint un 15% de la nota de l'assignatura.

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 i global de l'assignatura igual o superior a 9.00.

3.1.3. MOLT IMPORTANT:

Als alumnes matriculats per segona vegada o més:

Si l'alumne té aprovades les Pràctiques en un curs anterior, 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 3.1.1. 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:

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

b) 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 (Campus Virtual).

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
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
Entrega de qüestions breus i 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

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.

Materials:

Guia Docent:

<https://www.uab.cat/web/estudiar/llicitat-de-graus/pla-d-estudis/guies-docents/>

Diccionari de Terminologia Química:

<http://goldbook.iupac.org/>

Nomenclatura i Estructures:

<http://www.freechemsketch.com/>

Programa de dibuix d'estructures i útil per nomenclatura (llicència Campus UAB):

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

Espai virtual de l'assignatura (Campus Virtual), Moodle:

<https://cv.uab.cat/portada/ca/index.html>

Mecanismes de reaccions: Organic Chemistry Portal:

<https://www.organic-chemistry.org/namedreactions/>

Programari

Programes gratuïts d'edició de dibuixos d'estructures moleculars:

<https://chemaxon.com/products/marvin>

<https://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/index.php>