

Estructura i Reactivitat dels Composts Orgànics

Codi: 102528

Crèdits: 12

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OB	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

Equip docent

Ramón Alibes Arques

Marta Figueredo Galimany

Joan Pau Bayon Rueda

Adelina Vallribera Masso

Ona Illa Soler

Prerequisits

Cal tenir aprovades les assignatures de primer curs del Grau de Química: *Fonaments de Química I i Experimentació i Recursos Informàtics*

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 conformational 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. Aprenentatge 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 amb electròfils: 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

S'utilitzarà el Campus Virtual per lliurar als alumnes tot el material que el professorat consideri necessari pel procés d'aprenentatge: programa de l'assignatura, presentacions del temari, problemes per resoldre, vinculació del contingut a desenvolupar amb diversos llibres de text proposats, etc.

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 formatives dirigides per tal d'assolir els coneixements i competències establerts. Aquestes activitats seran:

Classes presencials magistrals: Durant una part d'aquestes sessions presencials el professorat ressaltarà aspectes teòrics seleccionats de la matèria dels diferents temes. Altre part d'aquestes classes es plantejaran

com a seminaris, dedicant temps a resoldre dubtes de l'alumnat, tant de continguts teòrics o de problemes com de qüestions organitzatives del curs. Finalment, en aquestes classes també es realitzaran al llarg del curs una sèrie de petites proves avaluadores (evidències). De manera habitual, es fomentarà la participació de l'alumnat mitjançant la resolució de casos i preguntes.

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

Pràctiques de laboratori: Es realitzarà una sèrie de sessions de 4 h de laboratori per tal de garantir l'adquisició de les tècniques bàsiques d'un laboratori de síntesi orgànica. Els continguts d'aquestes sessions aniran vinculats als temes tractats en el període de classes teòriques previ.

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 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	58	2,32	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	4	0,16	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	158	6,32	

Avaluació

La nota global final d'aquesta assignatura es calcula a partir de les notes obtingudes a les següents 3 parts:

Exàmens (75 % 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. Al llarg del curs, cada parcial inclourà preguntes sobre tot el temari impartit fins al moment. Aquests exàmens tindran un pes específic creixent sobre el total de la nota final dels exàmens:

- Primer parcial: temes de l'1 al 3; incidència en la nota final del 20%.
- Segon parcial: temes de l'1 al 6; incidència en la nota final del 25%.
- Tercer parcial: temes de l'1 al 9; incidència en la nota final del 30%.

Per fer mitjana ponderada per aprovar l'assignatura per parcials s'ha de tenir una qualificació mínima de 5 punts sobre 10 en el tercer parcial.

Pràctiques de laboratori (15 % de la nota final): Es valorarà l'interès, l'habilitat experimental i els resultats obtinguts durant les sessions de laboratori (40%), així com la nota obtinguda en l'examen de pràctiques (60%). Les sessions de pràctiques són obligatòries. Es podrà faltar com a màxim a dues sessions en cas de malaltia justificada mèdicament. Per fer mitjana per aprovar les pràctiques de laboratori, s'ha de

tenir una qualificació mínima de 5 punts sobre 10 tant en la nota de les sessions de laboratori com en la nota de l'examen de pràctiques.

ADVERTIMENT SOBRE SEGURETAT EN EL LABORATORI: La persona que, com a conseqüència d'un comportament negligent, es vegi involucrada en un incident que pugui tenir conseqüències greus de seguretat podrà ser expulsada 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 de manera presencial i complint les condicions establertes per aprovar-les podrà no repetir-les i se li mantindrà la nota del curs anterior. L'alumnat que no hagi fet mai les pràctiques presencials si que les haurà de fer i serà avaluat seguint el mateix procediment que l'alumnat matriculat per primer cop.

Altres evidències (10%): Al llarg del curs es podran plantejar exercicis, qüestionaris o altres petits treballs per realitzar de forma individual o en grup, a classe o fora de classe a criteri del professorat. Les evidències no realitzades 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 ponderada dels tres exàmens parcials de 5 punts sobre 10 o superior i una qualificació mínima de 5 sobre 10 en el tercer parcial. L'alumnat que s'hagi presentat a l'examen de recuperació haurà d'haver obtingut una nota d'examen de recuperació de 5 punts sobre 10 o superior.
- b) - Haver realitzat totes les sessions de pràctiques i obtingut una nota mínima de 5 punts sobre 10 en la seva avaluació global i una nota mínima de 5 punts sobre 10 en ambdós parts que amitanen pel càlcul de la nota global de pràctiques.
- 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 parcials. L'alumnat que hagi aprovat per curs i vulgui millorar la nota pot presentar-se a l'examen de recuperació. Si l'entreguen, en tots els casos, la nota que obtinguin substituirà a la mitjana ponderada dels parcials. Si no l'entreguen, conservaran la nota de la mitjana ponderada prèviament obtinguda.

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.

Per poder aprovar l'assignatura, l'alumnat que no hagi aprovat per parcials haurà d'obtenir una qualificació mínima de 5 punts sobre 10 en l'examen de recuperació. La nota final de l'assignatura, si s'ha participat en l'examen de recuperació, constarà de tres parts:

75 % nota de l'examen de recuperació.

10 % avaluació mitjançant evidències.

15 % nota final de pràctiques de laboratori.

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.

AVIS IMPORTANT: L'alumnat que en algun examen dels realitzats durant l'avaluació continuada es detecti que ha copiat, 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	75%	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	15%	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

Llibres 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.

Aquest llibre està disponible en format electrònic seguint l'enllaç següent:

https://cataleg.uab.cat/iii/encore/record/C__Rb2084284?lang=cat

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

Enllaços web:

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

Organic Chemistry Portal: www.organic-chemistry.org

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

Espai del Grau de Química:

<https://www.uab.cat/web/estudiar/llistat-de-graus/informacio-general/quimica-1216708251447.html?param1=126>

Programari

Programari lliure dibuix estructures moleculars, nomenclatura:

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

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