

Estructura y Reactividad de los Compuestos Orgánicos

Código: 102528
Créditos ECTS: 12

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2502444 Química	OB	2	A

Contacto

Nombre: Joan Pau Bayon Rueda
Correo electrónico: pau.bayon@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

Ramón Alibes Arques
Marta Figueredo Galimany
Joan Pau Bayon Rueda
Adelina Vallribera Masso
Ona Illa Soler

Prerequisitos

Es necesario tener aprobadas las asignaturas de primer curso del Grado en Química: *Experimentació i Recursos Informàtics*

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.

Substitución 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 4^o grado de oxidación.

8. Reactividad del carbono alfa en sistemas carbonílicos

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

Tautomería ceto-enólica.

Alfa-halogenación de aldehídos y cetonas. Alfa-halogenación de ácidos carboxílicos.

Formación de productos carbonílicos alfa,beta-insaturados: condensación aldólica.

Reacción de Cannizzaro.

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

Compuestos beta-dicarbonílicos: síntesis acetoacética y malónica.

9. Reacciones de substitución en compuestos aromáticos.

Compuestos aromáticos: benceno, policíclicos y heterocíclicos.

Reacción con electrófilos: substitución 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 substitución en compuestos aromáticos heterocíclicos.

Metodología

Se utilizará el Campus Virtual para entregar a los alumnos todo el material que el profesorado considere necesario para el proceso de aprendizaje: programa de la asignatura, presentaciones del temario, problemas por resolver, vinculación del contenido a desarrollar con varios libros de texto propuestos, etc.

De acuerdo con los objetivos de la asignatura, el alumnado en el transcurso del año deberá verse involucrado en una serie de actividades formativas dirigidas para alcanzar los conocimientos y competencias establecidos. Estas actividades serán:

Clases presenciales magistrales: Durante una parte de estas sesiones presenciales el profesorado resaltarán aspectos teóricos seleccionados de la materia de los distintos temas. Otra parte de estas clases se plantearán como seminarios, dedicando tiempo a resolver dudas del alumnado, tanto de contenidos teóricos o de problemas como de cuestiones organizativas del curso. Por último, en estas clases también se realizarán a lo largo del curso una serie de pequeñas pruebas evaluadoras (evidencias). De forma habitual, se fomentará la participación de alumnado mediante la resolución de casos y preguntas.

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

Prácticas de laboratorio: Se realizará una serie de sesiones de 4 horas de laboratorio para garantizar la adquisición de las técnicas básicas de un laboratorio de síntesis orgánica. Los contenidos de estas sesiones irán vinculados a los temas tratados en el período de clases teóricas previo.

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

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

Evaluación

La nota global final de esta asignatura se calcula a partir de las notas obtenidas en las siguientes 3 partes:

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. Durante el curso, cada parcial incluirá preguntas sobre todo el temario impartido hasta el momento. Estos exámenes tendrán un peso específico creciente sobre el total de la nota final de los exámenes:

- Primer parcial: temas del 1 al 3; incidencia en la nota final del 20%.
- Segundo parcial: temas del 1 al 6; incidencia en la nota final del 25%.
- Tercer parcial: temas del 1 al 9; incidencia en la nota final del 30%.

Para tener una media ponderada para aprobar la asignatura por parciales debe tenerse una calificación mínima de 5 puntos sobre 10 en el tercer parcial.

Prácticas de laboratorio (15% de la nota final): Se valorará el interés, la habilidad experimental y los resultados obtenidos durante las sesiones de laboratorio (40%), así como la nota obtenida en el examen de prácticas (60 %). Las sesiones de prácticas son obligatorias. Se podrá faltar como máximo a dos sesiones en caso de enfermedad médicamente justificada. Para promediar para aprobar las prácticas de laboratorio, se debe tener una calificación mínima de 5 puntos sobre 10 tanto en la nota de las sesiones de laboratorio como en la nota del examen de prácticas.

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

El alumnado matriculado por 2ª vez o más, que en un curso anterior realizara las prácticas de laboratorio de manera presencial y cumpliendo las condiciones establecidas para aprobarlas podrá no repetirlas y se le mantendrá la nota del curso anterior. El alumnado que no haya realizado nunca las prácticas presenciales sí que las tendrá que hacer y será evaluado siguiendo el mismo procedimiento que el alumnado matriculado por primera vez.

Otras evidencias (10%): A lo largo del curso se podrán plantear ejercicios, cuestionarios u otros pequeños trabajos a realizar de forma individual o en grupo, en clase o fuera de clase a criterio del profesorado. Las evidencias no realizadas computarán 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 ponderada de los tres exámenes parciales de 5 puntos sobre 10 o superior y una calificación mínima de 5 sobre 10 en el tercer parcial. El alumnado que se haya presentado en el examen de recuperación deberá haber obtenido una nota de examen de recuperación mínima de 5 puntos sobre 10.
- b) - Haber realizado todas las sesiones de prácticas y obtenido una nota mínima de 5 puntos sobre 10 en su evaluación global y una nota mínima de 5 puntos sobre 10 en ambas partes que promedian para el cálculo de la nota global de prácticas.
- c) - Obtener una media global de todos los aspectos evaluables de 5 de cada 10 puntos.

Recuperación:

Habrá un único examen de recuperación para todo el alumnado que no haya aprobado por parciales. El alumnado que haya aprobado por parciales y quiera mejorar la nota puede presentarse en el examen de recuperación. Si la entregan, en todos los casos, la nota que obtengan sustituirá a la media ponderada de los parciales. Si no lo entregan, conservarán la nota de la media ponderada previamente obtenida.

Para participar en el examen de recuperación de la parte teórica, el alumnado debe haberse presentado a los tres exámenes parciales de la asignatura.

Este examen incluirá materia de todo el curso.

Para poder aprobar la asignatura, el alumnado que no haya aprobado por parciales tendrá que obtener una calificación mínima de 5 puntos sobre 10 en el examen de recuperación. La nota final de la asignatura, si se ha participado en el examen de recuperación, constará de tres partes:

75% nota del examen de recuperación.

10% evaluación mediante evidencias.

15% nota final de prácticas de laboratorio.

Se considerará alumnado NO EVALUABLE aquél que:

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

b) Si estando matriculado por 2ª vez o más y teniendo las prácticas aprobadas: No haya realizado ninguno de los exámenes parciales ni las prácticas.

AVISO IMPORTANTE: El alumnado que en algún examen de los realizados durante la evaluación continuada se detecte que ha copiado, 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 (5ª Ed.)*, Ed. Omega, 2008

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

Este libro está disponible en formato electrónico:

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

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

Enlaces web:

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

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

Espacio web del Grado de Química:

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

Software

Programario libre dibujo estructuras moleculares, nomenclatura:

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

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