

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	34062
Nom	Química orgànica
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	12.0
Curs acadèmic	2019 - 2020

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1201 - Grau en Farmàcia	Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació	2	Anual
1211 - Doble Grau en Farmàcia i Nutrició Humana i Dietètica	Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació	2	Anual

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1201 - Grau en Farmàcia	2 - Química Orgànica	Obligatòria
1211 - Doble Grau en Farmàcia i Nutrició Humana i Dietètica	1 - Assignatures obligatòries del PDG Farmàcia-Nutrició Humana i Dietètica	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
BALLESTEROS CAMPOS, RAFAEL	325 - Química Orgànica

RESUM

El coneixement de l'estructura i reactivitat dels composts orgànics és indispensable per una bona comprensió dels processos bioquímics, del metabolisme i toxicologia dels fàrmacs i dels seu mecanisme d'acció a nivell molecular. A més, eixe coneixement també és necessari per plantejar la preparació de composts que mantinguen totes les seues característiques beneficioses però que no presenten efectes secundaris indesitjables.

L'assignatura s'ha organitzat en dos semestres. Els seus continguts s'han estructurat entorn de l'estudi dels grups funcionals més importants i freqüents en els composts orgànics. Com aquesta assignatura s'imparteix després que els estudiants hagen cursat Química General en primer curs, serà necessari simplement recordar i reforçar conceptes bàsics sobre l'estructura i tipus d'enllaços en aquest tipus de composts, mostrant especial atenció a les forces intermoleculares, tan importants en els processos de



reconeixement enzim-substrat o fàrmac-receptor. S'inclouen, a més, els conceptes generals d'acidesa-basicitat i la seua aplicació als composts orgànics, així com els de termodinàmica, cinètica i mecanismes en les reaccions químiques. Finalment, s'introduirà als estudiants en els aspectes fonamentals del disseny de la síntesi de molècules orgàniques i en les principals tècniques per a la seua investigació estructural. En el primer semestre s'han programat els Seminaris, en els que s'abordaran les principals tècniques per a la determinació estructural de composts orgànics.

En el segon semestre, els estudiants podran iniciar-se en l'ús de les tècniques més habituals de manipulació, transformació, aïllament, purificació i caracterització dels composts orgànics en les sessions pràctiques que es realitzaran en el laboratori.

CONEXIMENTS PREVIS

Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits

Coneixements bàsics de química general tant a nivell teòric (estructura atòmic i enllaç químic, cinètica i termodinàmica aplicada als processos químics, acidesa i basicitat,..) com a pràctic (maneig del material d'ús comú en un laboratori de química, operacions senzilles de separació, preparació de dissolucions, sabent aplicar les normes de seguretat adequades).

També es necessitaran els coneixements bàsics de Tècniques Instrumentals (assignatura obligatòria de primer de grau de Farmàcia) associades a la

COMPETÈNCIES (RD 1393/2007) // RESULTATS DE L'APRENENTATGE (RD 822/2021)

1201 - Grau en Farmàcia

- Saber interpretar, valorar i comunicar dades rellevants en els diferents vessants de l'activitat farmacèutica, fent ús de les tecnologies de la informació i la comunicació.
- Capacitat per a transmetre idees, analitzar problemes i resoldre'ls amb esperit crític, adquirint habilitats de treball en equip i assumint el lideratge quan siga apropiat.
- Saber aplicar els coneixements propis de l'àrea al món professional.
- Capacitat per a buscar i trobar coneixements relacionats amb l'àrea, sempre aplicant la capacitat crítica i autocrítica.
- Mòdul: Química - Conèixer i aplicar les tècniques principals d'investigació estructural incloent-hi l'espectroscòpia.
- Reconèixer els tipus d'enllaços que es poden presentar en els compostos orgànics.



- Conèixer i saber utilitzar els diferents tipus de representació de les molècules orgàniques.
- Saber aplicar les regles generals de nomenclatura per als compostos orgànics, incloent-hi l'estereoquímica.
- Conèixer els diferents grups funcionals presents en les molècules orgàniques i saber relacionar la presència de grups funcionals amb les propietats fisicoquímiques de les molècules orgàniques.
- Conèixer la reactivitat general dels grups funcionals més importants presents en les molècules orgàniques.
- Conèixer els mecanismes de les transformacions químiques més importants.
- Conèixer els mètodes d'obtenció més generals dels diferents tipus de compostos.
- Saber relacionar la presència de grups funcionals en les molècules amb la seua reactivitat enfront de diferents processos (substitució, eliminació, addició, hidròlisi, oxidació, reducció..)
- Comprendre i poder predir el comportament dels compostos orgànics en diferents entorns (químics, biològics, ambientals)
- Ser capaç de dissenyar síntesis de compostos orgànics senzills a partir de determinats productes de partida i que impliquen més d'una reacció.
- Saber aplicar les tècniques bàsiques d'obtenció, aïllament i caracterització dels compostos orgànics.
- Conèixer els riscos associats a l'ús de compostos orgànics i de les tècniques utilitzades en la seua manipulació, obtenció, aïllament, purificació i anàlisi.

RESULTATS D'APRENTATGE (RD 1393/2007) // SENSE CONTINGUT (RD 822/2021)

En aquest curs els estudiants hauran d'adquirir les següents capacitats i destreses:

- * Representar molècules orgàniques mitjançant els mètodes de representació més habituals.
- * Reconèixer l'estereoquímica dels composts orgànics.
- * Identificar els grups funcionals orgànics i aplicar les regles de nomenclatura.
- * Deducir les possibles forces intermoleculars entre els distints composts en funció de l'estructura dels grups funcionals que continguen.
- * Predir el comportament àcid-base de les molècules orgàniques.
- * Conèixer la reactivitat característica de cadascun dels grups funcionals.
- * Conèixer els mètodes d'obtenció més importants dels distints grups funcionals.



* Comprendre i aprendre a utilitzar els mecanismes de reacció com a interpretacions lògiques de les reaccions estudiades.

* Dissenyar síntesis senzilles.

* Relacionar els coneixements adquirits durant el curs amb les reaccions que tenen lloc en els processos metabòlics.

* Conèixer i saber utilitzar les tècniques més habituals utilitzades per a la preparació, aïllament, caracterització i identificació de composts orgànics senzills.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Conceptes generals. Estructura, mecanismes de reacció.

Bloc I:

ESTRUCTURA I ENLLAÇ EN COMPOSTS ORGÀNICS.- Introducció.- Grups funcionals.- Nomenclatura sistemàtica.- Fórmules estructurals.- Fórmules de Lewis.- Geometria molecular.- Enllaç covalent en composts de carboni.- Molècules polars i apolars.- Forces intermoleculars.- Models moleculars.

MECANISMES DE REACCIÓ.- Tipus de reaccions orgàniques.- Termodinàmica i cinètica de la reacció.- Perfils i mecanismes de reacció.- Reaccions polars: concepte de nucleòfil i electròfil.- Reaccions radicalàries.- Intermedis de reacció: radicals, carbanions, carbocations.

LA REACCIÓ ÀCID-BASE EN COMPOSTS ORGÀNICS.- Equilibris àcid-base.- Factors estructurals i electrònics que influeixen en l'acidesa i en la basicitat.

2. Hidrocarburs;Estereoquímica

Bloc II:

ALCANS I CICLOALCANS.- Estructura dels alcans.- Propietats físiques.- Anàlisis conformacional d'età i butà.- Cicloalcans.- Tensió d'anell.- Ciclohexà.- Ciclohexans substituïts: isomeria cis-trans.- Cicloalcans superiors i alcans policíclics: el nucli dels esteroides.- REACCIONS DELS ALCANS.- Combustió.- Halogenació d'alcans: mecanisme. - Estabilitat relativa de radicals.

ESTEREOQUÍMICA.- Estereoisòmers: Isòmers conformacionals i configuracionals.- Centres estereogènics.- Isòmers òptics i geomètrics.- Quiralitat.- Activitat òptica.- Racemats.- Nomenclatura dels enantiòmers: La regla R-S.- Projeccions de Fischer.- Configuracions D i L.- Compostos que contenen més d'un estereocentre.- Diastereòmers.- Compostos meso.- Resolució d'una mescla racèmica.

ALQUENS, ALQUINS I SISTEMES CONJUGATS.- Propietats físiques d'alquens.- Conveni E-Z per a alquens.-Estabilitats relatives dels alquens. REACTIVITAT: Reaccions polars d'addició d'electròfils simètrics i no simètrics.- Estabilitat dels carbocations.- Regioselectivitat.- Hidrogenació catalítica.-



Oxidació.- Reaccions dels alquins.- Acidesa dels alquins terminals.- Sistemes conjugats: Addició electrofílica. Cicloadició de Diels-Alder.

COMPOSTS AROMÀTICS.- Nomenclatura de benzens substituïts.- Altres anells aromàtics i heteroaromàtics.- SUBSTITUCIÓ ELECTROFÍLICA AROMÀTICA.- Halogenació, nitració i sulfonació.- Les reaccions de Friedel-Crafts.- Activació i desactivació de l'anell benzènic.- Orientació en la substitució aromàtica electrofílica.- substitució aromàtica nucleofílica.- Hidrocarburs aromàtics policíclics.- Reactivitat del sistema benzílic.

3. Composts amb enllaços senzills carboni-heteroàtom

Bloc III:

COMPOSTS ORGÀNICS HALOGENATS.- Estructura i propietats físiques dels haloalcans.- SUBSTITUCIÓ NUCLEOFÍLICA. Aplicacions sintètiques.- Mecanisme SN₂.- Mecanisme SN₁: Solvòlisi. Deshidrohalogenació: Reacció d'eliminació.- Mecanismes E₁ i E₂. Competició entre substitució i eliminació.- Algunes aplicacions dels derivats halogenats. REACTIUS ORGANOMETÀLLICS: Estructura i reactivitat.

ALCOHOLS, FENOLS I TIOLS.- Estructura i propietats físiques dels alcohols.- Nomenclatura d'alcohols i fenols.- Acidesa i basicitat.- Preparació d'alcòxids i carbocacions.- Deshidratació d'alcohols.- Transformació en haloalcans i sulfonats.- Oxidació d'alcohols, diols i de fenols. Tiols: propietats i reactivitat.- Importància biològica.

ÈTERS, EPÒXIDS I SULFURS.- Nomenclatura i propietats dels èters.- Trencament d'èters.- Èters com a dissolvents.- Èters cíclics.- Reaccions d'obertura d'epòxids.- Sulfurs: estructura, síntesi i aplicacions.

AMINES I ALTRES COMPOSTS NITROGENATS.- Estructura.- Nomenclatura.- Propietats físiques.- Acidesa i basicitat de les amines.- Síntesi d'amines.- Reaccions.- Característiques de les amines aromàtiques.- Les sals d'arenodiazoni com a intermedis en síntesi orgànica.

4. Composts amb enllaços múltiples carboni-heteroàtom

Bloc IV:

ALDEHIDS I CETONES. EL GRUP CARBONIL.- Nomenclatura d'aldehids i cetones.- Estructura del grup carbonil.- Addició nucleofílica al carbonil.- Addició d'aigua i alcohols: Acetals i hemiacetals: Estructura cíclica dels sucres.- Addició de nucleòfils de carboni.- Addició d'amines i composts relacionats.- Reducció.- Oxidació.

Enols i ions enolat.- Equilibri ceto-enòlic. Condensació aldòlica.

ÀCIDS CARBOXÍLICS I ELS SEUS DERIVATS.- Nomenclatura dels àcids.- Estructura.- Propietats físiques.- Acidesa i basicitat dels àcids carboxílics.- Derivats d'àcids carboxílics.- Reactivitat del grup carboxílic: el mecanisme d'addició-eliminació.- Transformacions d'àcids carboxílics en els seus derivats: halurs d'acil, anhídrids, esters i amides. Reaccions dels derivats d'àcids. Reacció de Claisen. Reaccions



de carbanions estabilitzats. Síntesi malònica i acetilacètica. NITRILS I ISOCIANATS. Estructura i reactivitat general. Aminoàcids, pèptids i proteïnes.- Carbamats.

HETEROCICLES AROMÀTICS SENZILLS: Abundància. Heterocicles aromàtics de sis membres senzills i benzocondensats: Piridina, benzopiridines i diazines. Heterocicles aromàtics de cinc membres amb un heteroàtom i benzocondensats. 1,2- i 1,3- Azoles.

5. Disseny i síntesi de composts orgànics senzills

Bloc V:

INTRODUCCIÓ A LA SÍNTESI ORGÀNICA. Planificació d'una síntesi. Mètode de les desconexions. Estratègies de síntesi. Espècies de carboni electrofílic i espècies de carboni nucleofílic.

QUIMIOSELECTIVITAT I GRUPS PROTECTORS. Grups protectors d'alcohols i amines.- Grups protectors de carbonil.

6. Sessions practiques en laboratori

Bloc VI: 20h

SESSIONS PRÀCTIQUES EN LABORATORI:

- NORMES DE SEGURETAT AL LABORATORI DE QUÍMICA ORGÀNICA
- INTRODUCCIÓ A LES TÈCNiques DE SEPARACIÓ, PURIFICACIÓ I CARACTERITZACIÓ DE COMPOSTS ORGÀNICS
- APLICACIÓ A LA SÍNTESI D'UN COMPOST ORGÀNIC

7. Sessions pràctiques en Seminaris

Bloc VII: 8h

ANÀLISI ESTRUCTURAL DELS COMPOSTS ORGÀNICS. Aplicació de les tècniques d'Espectrometria de masses, UV-Visible, IR i RMN a la determinació de les estructures de composts orgànics senzills.

**VOLUM DE TREBALL**

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	56,00	100
Seminaris	36,00	100
Pràctiques en laboratori	20,00	100
Tutories reglades	6,00	100
Elaboració de treballs en grup	14,00	0
Estudi i treball autònom	8,00	0
Preparació d'activitats d'avaluació	40,00	0
Preparació de classes de teoria	44,00	0
Preparació de classes pràctiques i de problemes	70,00	0
TOTAL	294,00	

METODOLOGIA DOCENT

* **Classes teòriques.**- En aquestes classes el professor exposarà el tema objecte d'estudi fent especial insistència en els aspectes nous o d'especial complexitat i fent ús de les noves eines de la informació i comunicació. S'indicaran als estudiants els punts que han de revisar prèviament a l'assistència a cada classe. Es potenciarà la participació de l'estudiant.

* **Classes pràctiques: problemes.**- Es dedicaran 28h dels seminaris a les classes de problemes. En aquestes classes es durà a terme l'aplicació específica dels coneixements que els estudiants hagen adquirit a les classes de teoria. Els estudiants deuran, prèviament, haver treballat els problemes que es van a resoldre. La resolució de tals problemes es durà a terme preferentment pels alumnes, en grup o de forma individualitzada, encara que la discussió aniria dirigida pel professor. Aquestes classes requereixen un treball personal de l'estudiant superior al d'altres activitats.

* **Tutories.**-Els alumnes acudirán a elles en grups reduïts. En elles, el professor avaluarà el procés d'aprenentatge dels estudiants d'una manera globalitzada. Igualment, les tutories serviran per a resoldre tots els dubtes que hagen pogut sorgir al llarg de les classes i orientarà els estudiants sobre els mètodes de treball més útils per a la resolució dels problemes que se'ls puguén presentar. El professor podrà plantejar qüestions i problemes específics segons les necessitats dels estudiants i aquests hauran d'entregar-los resolts en la següent sessió de tutories, quan així ho sol·licite el professor.



* **Seminaris.**- Els seminaris seran emprats en l'exposició de les metodologies actuals per a la determinació de les estructures de composts orgànics així com en el maneig de programes de dibuix i modelització en ordinador. Es dedicaran 8h per a la seua realització.

* **Classes pràctiques de laboratori.**-En elles els estudiants prendran contacte amb un laboratori de química orgànica, aprendran a conèixer les tècniques bàsiques d'obtenció, aïllament i purificació de composts orgànics senzills, així com els riscos associats a la manipulació i ús d'aquests productes i de les tècniques emprades.

* **Realització i preparació d'exàmens escrits.**

AVALUACIÓ

L'avaluació de l'aprenentatge es durà a terme de forma contínua i es realitzarà de forma coordinada per a tots els grups.

- Un 5% de la nota procedirà de l'AVALUACIÓ DIRECTA del professor a les classes i tutories. En aquesta avaluació es tindran en compte distints aspectes, entre els que cal destacar:

- Assistència participativa en les discussions plantejades a les classes
- Progrés en l'ús del llenguatge característic de la química orgànica.
- Capacitat per a la resolució de problemes i plantejament de dubtes.

- Un 10% de la nota s'obtindrà com a resultat de la participació en la resolució dels problemes, tant en classe com els presentats en forma escrita, en els SEMINARIS.

- Un 15% de la nota correspondrà a l'assistència i participació a les CLASSES PRÀCTIQUES de laboratori. L'assistència a aquestes activitats serà necessària per a la superació de l'assignatura i a més s'haurà d'obtenir un mínim del 40% de la nota màxima. No serà necessari realitzar-les novament quan hagen sigut superades.

Per a la nota de les pràctiques es consideraran els aspectes següents:

- Demostrar coneixement de les tècniques experimentals, mantenir una actitud participativa i de respecte a les normes de seguretat (40%)
- Preparació al dia de les pràctiques i redacció del quadern de laboratori (20%)
- Examen de qüestions relacionades amb el desenvolupament de les pràctiques (40%).

No serà necessari realitzar novament les pràctiques quan hagen sigut superades prèviament. La nota de practiques es mantindrà durant els tres cursos següents.



- Un 70% de la nota s'obtindrà a partir dels resultats obtinguts en els EXÀMENS TEÒRICS.

Els exàmens seran posats en comú pels professors de tots els grups, encara que no necessàriament seran exactament iguals per a tots els grups.

Durant el 1er quadrimestre es realitzaran dues avaluacions parcials en les dates previstes en el calendari, i una en el segon quadrimestre, al juny.

En tot cas, perquè els exàmens siguin compensables entre si, s'hauran d'obtindre, almenys, 4 punts. La nota mitjana mínima per superar aquest bloc, ha de ser de 4.5 punts o superior. En aquest cas, només faltaria sumar les notes corresponents a les pràctiques de laboratori, seminaris i d'avaluació directa per obtindre la nota final.

Per a la 2a convocatòria d'examen teòric es guardaran les notes dels parcials realitzats.

Els que no es presenten a l'examen teòric però hagen realitzat altres activitats (pràctiques, seminaris, ...) tindran les qualificacions de "No Presentat" en l'Acta de la 1a convocatòria, i de "Suspens" en la de la 2a convocatòria.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- K. P. C. Vollhardt, N.E. Schore. Química Orgànica (5ª ed.). Ed. Omega (2007).
- F.A. Carey. Química Orgànica (6ª ed.) Mc Graw-Hill (2006).
- L. G. Wade Jr. Química Orgànica (5ª ed.). Ed. Pearson Prentice Hall (2004)
- P. Yurkanis Bruice Química Orgànica (5ª ed.). Ed. Pearson Prentice Hall (2008)
- D. Klein Química Orgànica (1ª ed.) Ed. Panamericana (2012).

Complementàries

- ChemBioOffice Ultra, PerkinElmer (CambridgeSoft) Amplia selecció de aplicacions y funcionalidades que permite estudiar, dibujar, formular, modelar y editar estructuras moleculares químicas y biológicas."
- J.R. Pedro y G. Blay 200 Problemas de Determinación estructural de Compuestos Orgánicos. Ed. Visión Libro 2010 (Madrid)
- W.R. Peterson. Formulación y nomenclatura química orgánica. (4ª ed) Ed. Reverte (2016)

ADDENDA COVID-19



Aquesta addenda només s'activarà si la situació sanitària ho requereix i previ acord del Consell de Govern

1. Continguts

Es mantenen els continguts inicialment recollits en la guia docent pel que fa als blocs I a IV, i VII, i es redueixen al 50% els corresponents al bloc V, deixant-se l'aspecte d'aplicació específica a la Química Farmacèutica de 3r curs.

El bloc VI (pràctiques de laboratori) es manté igual per als estudiants que havien realitzat les pràctiques amb anterioritat a la cessació de les activitats presencials. Per a la resta, s'adaptaran alguns continguts per a ser impartits on line i, en la mesura del possible, es programaran sessions de laboratori durant el proper curs perquè completen l'adquisició de les competències que corresponen a aquesta activitat abans de realitzar el laboratori de química Farmacèutica.

2. Volum de treball i planificació temporal de la docència

Es manté el pes de les diferents activitats, excepte per als estudiants que no han pogut realitzar les sessions de pràctiques de laboratori,

Considerant les característiques de la metodologia substitutiva de la presencial, en general no es mantenen els horaris. Es dona llibertat als estudiants perquè coordinen les activitats d'aquesta assignatura amb les d'altres en les quals estiga matriculat.

3. Metodologia docent

El material no impartit de manera presencial es puja a l'Aula Virtual utilitzant diferents modalitats en funció de les seues característiques, com fitxers amb narració o pdfs amb notes, entre altres.

Es proposa la resolució de problemes i el seu lliurament, en certs casos, en un termini determinat, al final del qual es presenten les solucions.

Quan és necessari, es realitzen videoconferències síncrones emprant BBC des d'aula virtual, tant per a l'explicació d'alguns continguts com per a algunes tutories i seminaris.

S'inclouen vídeos i materials escrits sobre les tècniques experimentals en química orgànica per als estudiants que no han realitzat les pràctiques de laboratori.

4. Avaluació

Per als alumnes que han realitzat les pràctiques de laboratori es mantenen els percentatges inicials. Per aquells que no les han realitzades, el percentatge de l'apartat Laboratori es redueix al 10%, basat en les activitats no presencials alternatives programades, i s'augmenta un 5% la valoració de l'apartat Examen.



L'examen podrà realitzar-se on line utilitzant les opcions que ofereix l'aula virtual. Per als alumnes que han superat, o compensat, els dos primers parcials, en l'examen del tercer parcial s'avaluarà el coneixement dels continguts impartits en el segon semestre. L'examen final dels continguts teòrics, per aquells que no han superat els parcials anteriors, es realitzarà mitjançant una prova en aula virtual que cobrirà tots els continguts impartits en el curs. En qualsevol cas, no es descarta la possibilitat d'una avaluació oral, si escau.

5. Bibliografia

Es manté part de la bibliografia recomanada, a l'estar disponible en línia (els llibres de Yurkanis, Klein i Wade) des del Servei de Biblioteques de la UV. ES afegeix el llibre de problemes: "Cuestiones y Ejercicios de Química Orgànica: una guía de estudio y autoevaluación". E. Quiñoa y R Riguera, també disponible com e-book al Servei de Biblioteques de la UV.

A més, es recomana la consulta dels continguts inclosos en les pàgines web següents:

1) De Química Orgànica general:

<http://www.quimicaorganica.net>

<http://www.organic-chemistry.org/reactions.html>

<http://www.quimicaorganica.org/>

<http://www.organic-chemistry.org/>

2) Sobre simulacions i animacions de reaccions:

<http://www.chemtube3d.com/index.html>

<http://www.liv.ac.uk/chemistry/Links/links.html>

3) Vídeos sobre tècniques experimentals en química orgànica:

Cromatografia de capa fina - <https://www.youtube.com/watch?v=CmHFVxTxkGs>

Punt de fusió i cristal·lització - https://www.youtube.com/watch?v=7Ym-QyLpsiE&list=PLAhRiX8pHhMLvkECEEmqF8jCbmoNYq7v_

Extracció - https://www.youtube.com/playlist?list=PLAhRiX8pHhMLEDVKS_tz-Snk7hyVh9qE4