VNIVERSITAT DE VALÈNCIA

Guia Docent
34205 Química orgànica III

FITXA IDENTIFICATIVA

Dades de l'Assignatura

Codi	34205
Nom	Química orgànica III
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2016 - 2017

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1108 - Grau de Química	Facultat de Química	3	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1108 - Grau de Química	9 - Química Orgánica	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
ASENSIO AGUILAR, GREGORIO	325 - Química Orgànica

RESUM

L'assignatura de Química Orgànica III que s'imparteix en tercer curs del Grau en Química suposa una continuació i aprofundiment dels coneixements adquirits en les assignatures Química Orgànica I i II que s'imparteixen en segon curs del Grau.

La Química Orgànica és la branca de la Química que estudia l'estructura, reactivitat i síntesi dels compostos del carboni. El seu estudi abasta el comportament de molts milions de compostos químics amb propietats diverses, la qual cosa constitueix un dels grans reptes de l'ensenyament d'aquesta disciplina: mostrar la Química Orgànica com un cos lògic i consistent d'idees interrelacionades i no com una mera col·lecció de fets sense connexió alguna entre ells.

De la rellevància de la Química Orgànica dóna idea el fet que aquesta disciplina sobrepassa els límits purament acadèmics i és part important de la vida mateixa. Els lípids, carbohidrats, proteïnes i àcids nucleics, tots ells compostos essencials per a la vida, són compostos orgànics. També ho són moltes substàncies que ens faciliten la vida quotidiana, tals com fibres tèxtils, medicaments, antioxidants, etc.

El coneixement de l'estructura dels compostos orgànics ens ha de conduir a la comprensió de la seua reactivitat i, en conseqüència, la comprensió dels processos biològics en els quals estan implicats molts compostos orgànics. Així mateix, el coneixement de la reactivitat ens ha de permetre el disseny de nous mètodes de síntesis conduents a la preparació de compostos orgànics amb propietats útils i sense efectes secundaris indesitjables. Tals síntesis hauran de ser dutes a terme d'una manera sostenible, és a dir, amb una mínima generació de residus.

L'estudi de l'assignatura Química Orgànica III es basa en els coneixements adquirits en les assignatures prèvies de Química Orgànica I i II i, per descomptat, en les assignatures de Química General I i II. A partir d'aquests coneixements, es durà a terme l'estudi sistemàtic d'alguns grups funcionals que completen els ja vists, així com de diferents compostos orgànics bifuncionals, inclosos els grups de productes naturals més representatius. Aquest estudi es completarà d'una banda amb una introducció als mètodes espectroscòpics com a eina per a la determinació estructural de compostos orgànics i, per un altre, amb una introducció al disseny de síntesi.

Els objectius que es pretenen aconseguir en aquesta assignatura es poden resumir en els següents punts:

- Identificar els diferents grups funcionals presents en les molècules orgàniques polifuncionals, les seues posicions relatives i comprendre les interaccions entre aquests grups funcionals.
- Estudiar la reactivitat i mètodes d'obtenció de compostos orgànics que contenen fòsfor, sofre i silici.
- Estudiar la reactivitat i mètodes d'obtenció de compostos aromàtics monocíclics i bicíclics simples amb anell heterocíclic hexagonal.
- Estudiar la reactivitat i mètodes d'obtenció de compostos aromàtics monocíclics i bicíclics simples amb anell heterocíclic pentagonal.
- Identificar els principals grups de productes naturals del metabolisme primari i secundari, així com conèixer la seua importància.
- Dissenyar síntesis senzilles de compostos orgànics a partir dels productes de partida indicats i que impliquen seqüències sintètiques de fins a 5 etapes.
- Introduir els conceptes bàsics dels mètodes espectroscòpics per a la determinació d'estructures de compostos orgànics.

CONEIXEMENTS 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

L'estudi de la Química Orgànica III es basa en els coneixements adquirits en les assignatures de Química Orgànica I i II, on l'estructura i reactivitat dels grups funcionals ja vists és important per entendre els sistemes més complexos que s'estudiaran aquí. És fonamental que sempre s'afermin els coneixements de nomenclatura i representació dels compostos orgànics, incloent també les seves configuracions i conformacions.

COMPETÈNCIES

1108 - Grau de Química

- Desenvolupar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític.
- Demostrar capacitat inductiva i deductiva.
- Demostrar capacitat de gestió i direcció, esperit emprenedor, iniciativa, creativitat, organització, planificació, control, lideratge, presa de decisions i negociació.
- Resoldre problemes de forma efectiva.
- Demostrar habilitat per a transmetre informació, idees, problemes i solucions tant a un public especialitzat com no especialitzat i utilitzant si escau les tecnologies de la informació.
- Comprometre's amb l'ètica, els valors d'igualtat i la responsabilitat social com a ciutadà i com professional.
- Aprendre de forma autònoma.
- Demostrar capacitat per a adaptar-se a situacions noves.
- Demostrar que coneix els aspectes principals de terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.
- Interpretar la variació de les propietats característiques dels elements químics segons la taula periòdica.
- Demostrar que coneix els tipus principals de reacció química i les seues característiques principals associades.
- Demostrar que coneix els principis de termodinàmica i cinètica i les seues aplicacions en química.
- Demostrar que reconeix els elements químics i els seus compostos: obtenció, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions.
- Demostrar que coneix els principis, els procediments i les tècniques per a la determinació, la separació, la identificació i la caracterització de compostos químics.

- Demostrar el coneixement i la comprensió dels fets essencials, dels conceptes, dels principis i de les teories relacionades amb les àrees de la química.
- Resoldre problemes qualitatius i quantitatius segons models desenvolupats prèviament.
- Avaluar, interpretar i sintetitzar les dades i la informació Química.
- Manipular amb seguretat els productes químics.
- Manejar la instrumentació química utilitzada en les diferents àrees de la Química.
- Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.
- Desenvolupar metodologies sostenibles i respectuoses amb el medi ambient.
- Relacionar la química amb altres disciplines.
- Que els estudiants sàpien aplicar els seus coneixements al seu treball o vocació d'una forma professional i posseïsquen les competències que solen demostrar-se per mitjà de l'elaboració i defensa d'arguments i la resolució de problemes dins de la seua àrea d'estudi.
- Que els estudiants tinguen la capacitat d'arreplegar i interpretar dades rellevants (normalment dins de la seua àrea d'estudi) per emetre judicis que incloguen una reflexió sobre temes rellevants d'índole social, científica o ètica.
- Que els estudiants puguen transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.
- Que els estudiants hagen desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per a emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.
- Expressar-se correctament, tant en forma oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.
- Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda.

RESULTATS DE L'APRENENTATGE

1 Demostrar coneixement dels aspectes principals de terminologia i nomenclatura orgànica. (CE1)

2 Comprendre les propietats estructurals i la reactivitat dels compostos i dels grups funcionals orgànics aplicant-los a la solució de problemes sintètics i estructurals. (CG8, CG10, CE2,CE4, CE6, CE7,CE23,

CE26)

4 Explicar de manera comprensible fenòmens i processos relacionats amb la Química Orgànica. (CG1, CG2,CE13)

5 Adquirir i utilitzar informació bibliogràfica i tècnica referida als compostos orgànics. (CG7, CE16, CT3)

6 Escriure i exposar en la llengua nativa amb correcció (CT1)

7 Realitzar eficaçment les tasques assignades com a membre d'un equip amb perspectiva de gènere (CG3, CG5)

8 Demostrar coneixement de metodologies sostenibles en química orgànica. (CE25)

13 Prendre decisions amb rigor. (CG3, CG6, CG9)

14 Demostrar raonament crític. (CG1)

15 Demostrar aprenentatge autònom. (CG8)

16 Resoldre problemes amb rigor. (CG4, CG10, CE14, CE15)

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Compostos dicarbonílics i compostos carbonílics insaturats.

*Part 1: compostos amb dos grups carbonil. Enolització de compostos beta-dicarbonílics: estabilitat i reactivitat dels anions enolat. Descarboxilació de beta-cetoàcids. Síntesi malònica i síntesi acetilacètica. Preparació de compostos beta-dicarbonílics: condensacions de Claisen i Dieckmann. Condensacions de Claisen croades. Acilació de enamines.
Parte 2: compostos carbonílics insaturats. Estabilitat addicional dels compostos carbonílics alfa,beta-insaturats pel que fa als no conjugats. Reaccions dels compostos carbonílics alfa,beta-insaturats: addicions 1,2 (addició directa) i 1,4 (addició conjugada o addició de Michael). Exemple il·lustratiu: addició de HCN. Addició de nucleòfils heteroatòmics. Epoxidació nucleofílica. Addicions conjugades de nucleòfils carbonats. Addició de compostos organometàl·lics: (a) derivats de Li i Mg. (b) organocuprats. Addició d'anions enolat. Reacció de anel·lació de Robinson. Mètodes d'obtenció de compostos carbonílics alfa,beta-insaturats.

2. Compostos de sofre, fòsfor i silici.

Propietats, preparació i reactivitat de les principals funcions orgàniques amb fòsfor: fosfines i sals de fosfoni, fosfats i fosfonats, ilurs de fòsfor. Reacció de olefinació de Wittig. Propietats, preparació i reactivitat de les principals funcions orgàniques amb sofre: tioalcohols i tioèters, sulfòxids i sulfones, ilurs de sofre i àcids sulfònics. Propietats, preparació i reactivitat de les principals funcions orgàniques amb silici: silans. Reacció d'olefinació de Peterson. Aplicacions sintètiques.

3. Reactius organometàl·lics

Pautes mecanístiques bàsiques de les reaccions organometàl·liques. Intercanvi de lligands. Addició oxidant i eliminació reductora. Inserció migratòria. Transmetal·lació. Mètodes principals de preparació de compostos organometàl·lics. Derivats organometàl·lics de liti i magnesi: reaccions amb diferents funcions orgàniques. Derivats organometàl·lics de coure. Metalls de transició en síntesi orgànica: processos catalítics. Acoblament de compostos organometàl·lics catalitzats per pal·ladi: reaccions de Stille, Suzuki i Sonogashira. Processos catalítics que impliquen a enllaços múltiples carboni-carboni. Reaccions de Heck i Wacker. Acoblament de heteronucleòfils catalitzats per pal·ladi: reaccions de tipus Buchwald-Hartwig. Metàtesi de diens.

4. Compostos heterociclics aromàtics.

Heterocicles pi-deficients i pi-excedents. Heterocicles aromàtics de sis membres: piridina. Reaccions de la piridina. Diazines. Heterocicles aromàtics de cinc membres: pirrol, furà i tiofè. Azoles. Reaccions dels heterocicles pentagonals. Mètodes de preparació d'anells hexagonals i pentagonals. Sistemes heterocíclics condensats. Sistemes heterocíclics d'interès biològic.

5. Productes Naturals.

Metabòlits primaris i secundaris. Carbohidrats. Classificació. Monosacàrids. Formes cícliques dels monosacàrids. Estructura de la glucosa. Carboni anomèric i unió glicosídica. Disacàrids i polisacàrids. Glicòsids. Àcids nucleics. Nucleòsids i nucleòtids. Codi genètic. Aminoàcids. Unions peptídiques. Polipèptids. Proteïnes. Estructura tridimensional de les proteïnes.

6. Anàlisi retrosintètic

Desconnexió retrosintètica: concepte de sintó. Estratègies fonamentals. Ordre d'esdeveniments sintètics. Construcció de l'esquelet: reconeixement de models estructurals. Formació d'enllaços C-C i C-heteroàtom. Formació d'estructures cícliques. Grups protectors.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	51,00	100
Tutories reglades	9,00	100
Estudi i treball autònom	90,00	0
TOTAL	**150,00**	

METODOLOGIA DOCENT

L'assignatura està plantejada perquè l'estudiant siga el protagonista del seu propi aprenentatge i s'estructura de la següent manera:
* Material docent.- Des del principi de curs els estudiants disposaran del material pedagògic corresponent al curs.
* Classes de teoria i problemes.- Les classes de teoria es dedicaran a exposar als estudiants els aspectes més fonamentals de la matèria. En les classes de problemes es durà a terme l'aplicació específica dels coneixements que els estudiants hagen adquirit en les classes de teoria. Els estudiants hauran d'haver treballat prèviament els problemes que es van a resoldre. La resolució d'aquests problemes es discutirà en classe conjuntament pel professor i els alumnes. Totes aquestes classes es complementen amb el temps d'estudi personal.
* Tutories.- En elles s'avaluarà el procés global d'aprenentatge dels estudiants. En les sessions de tutoria es podrà arreplegar els treballs que hagen sigut encomanats pel professor als alumnes. Igualment, les tutories serviran per a resoldre els dubtes que hagen pogut sorgir al llarg de les classes i orientar als estudiants sobre els mètodes de treball més convenients per a la resolució dels problemes que se'ls puguen presentar.
* Seminaris.- Els seminaris seran dedicats a una discussió més profunda de temes el contingut dels quals fa convenient un estudi més detallat. Alguns d'aquests seminaris seran dedicats a la presentació per un especialista de tema rellevant en Química actual.

Seminaris-Conferències: Els Seminaris-Conferències versaran sobre aspectes complementaris de la seva formació en Química Orgànica. Per a aquesta tasca, els estudiants assistiran a l'acte i contestaran un qüestionari preparat pel professor.

AVALUACIÓ

L'avaluació de l'aprenentatge dels estudiants tindrà en compte tots els aspectes exposats en l'apartat de Metodologia d'aquesta guia docent. L'assistència i complementació del qüestionari del Seminari-Conferència tindrà una equivalència d'una tutoria.

L'avaluació de l'aprenentatge es durà a terme de forma contínua per part del professor al llarg del curs. Els diferents apartats que s'avaluaran són els següents:

Avaluació directa del professor (5 punts): en aquest avaluació es tindran en compte diferents aspectes,

entre els quals cal destacar:

Assistència i participació raonada i clara en les discussions plantejades.
Progrés en l'ús del llenguatge característic de la química orgànica.
Resolució de problemes i plantejament de dubtes.
Qualificacions obtingudes per cada estudiant al llarg del curs en les preguntes personals realitzades pel professor.
Esperit crític.

Seminaris i tutories (15 punts): l'avaluació d'aquest tipus d'activitat tindrà en compte els següents aspectes:

Presentació en classe de les tasques proposades pel professor.

Examen final (80 punts): es realitzarà en la data indicada per la Facultat i serà comuna a tots els grups de l'assignatura. Constarà de preguntes teòric-pràctiques relacionades amb la matèria explicada durant el període docent de la mateixa. L'aprovat global en l'assignatura portarà necessàriament implicat l'haver obtingut en l'examen una puntuació mínima de 40 punts sobre els 80 totals.

La qualificació global mínima per a aprovar l'assignatura és de 50.0 punts.

L'estudiant podrà acollir-se a ser avaluat únicament amb un examen escrit sobre els continguts de l'assignatura tractats en les classes de teoria, les tutories i els seminaris, de manera que el professor podrà així avaluar si l'estudiant ha adquirit les competències i coneixements relacionats amb l'assignatura. Aquest examen suposarà el 100 % de la qualificació global.

En aquest cas, l'estudiant haurà de renunciar a l'avaluació contínua i acollir-se a aquesta modalitat d'avaluació comunicant-ho abans de la primera convocatòria mitjançant escrit presentat amb registre d'entrada en la secretaria del departament.

En l'avaluació de la segona convocatòria, es mantindrà la qualificació obtinguda en l'avaluació continuada (punt 1-“Avaluació directa del Professor- i Punt 2-“Seminaris de Química Orgànica i Tutories”-) de la primera convocatòria i es procedirà a avaluar de nou la part corresponent al Punt 3 –"Exàmens".

REFERÈNCIES

Bàsiques

- Clayden, N. Greeves, S. Warren Organic Chemistry Oxford University Press,(2012), 2nd Edition.
- Bruice P. Y. Química Orgánica Pearson Prentice Hall (2008), 5ª edición en castellano
- Wade, L. G. Química Orgánica. Pearson Prentice Hall (2004), 5ª edición en castellano.
- VolIhardt, K. P. C. "Química Orgánica Estructura y Función". Ediciones Omega, S.A. (2008), 5ª edición en castellano.
- McMurry, J.. Química Orgánica Cengage Learning Editores. S. A. (2008) 7ª edición.
- Duckett S., Gilbert B. Foundations of Spectroscopy Oxford Chemistry Primers nº 78, Oxford University Press (2000).
- ChemBioOffice Ultra, PerkinElmer (CambridgeSoft)

Complementàries

- Carey F. A., Sundberg R. J., Advanced Organic Chemistry, Vols. A y B, 4ª Ed., Plenum Press (2000)
- Carroll A. , Perspectives on Structure and Mechanism in Organic Chemistry, Brooks/Cole Publishing Company (1998).
- Warren S. y Wyatt P. , "Organic Synthesis. The Disconnection Approach", John Wiley and Sons, 2ª Ed. (2009).
- M. B. Smith, "Organic Synthesis" 2ª Ed, Mc Graw Hill Higher Education (2002).
- Carda M., Marco J. A., Murga J. y Falomir E. , "Análisis retrosintético y síntesis orgánica. Resolución de ejemplos prácticos", Publicacions de la Universitat Jaume I, Castellón (2010).
- Joule J. A., Mills K., Heterocyclic Chemistry, 4ª Ed., Blackwell Publishing (2003).
- Marco J. A., "Química de los Productos Naturales, Editorial SÍNTESIS (2006).
- Harwood L. M., Claridge T. D. W., Introduction to Organic Spectroscopy, Oxford Chemistry Primers nº 43, Oxford University Press (1996).