

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

Codi	34205
Nom	Química orgànica III
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2018 - 2019

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1110 - Grau de Química V2-2018	Facultat de Química	3	Segon quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1110 - Grau de Química V2-2018	9 - Química Orgànica	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
MARCO VENTURA, JUAN ALBERTO	325 - Química Orgànica

RESUM

L'assignatura *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 *Química orgànica II* que s'imparteixen en segon curs del grau.

La química orgànica és la branca de la química que estudia l'estructura, la reactivitat i la 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 cap connexió entre si.



De la rellevància de la química orgànica dóna idea el fet que aquesta disciplina depassa els límits purament acadèmics i és part important de la vida mateixa. Els lípids, els carbohidrats, les proteïnes i els àcids nucleics, tots els quals són compostos essencials per a la vida, són compostos orgànics. També ho són moltes substàncies que ens faciliten la vida quotidiana, com ara 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 què 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 es duen a terme de 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 *Química orgànica II* i, per descomptat, en les assignatures de *Química general I* i *Química general II*. A partir d'aquests coneixements, es du a terme l'estudi sistemàtic d'alguns grups funcionals que completen els que ja s'han vist, i també de diferents compostos orgànics bifuncionals, inclosos els grups de productes naturals més representatius. Aquest estudi es completa, d'una banda, amb una introducció al disseny de síntesi i, de l'altra, amb una introducció als processos catalitzats per metalls de transició i a les reaccions pericícliques.

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

- Identificar els diferents grups funcionals presents en les molècules orgàniques polifuncionals, i les seues posicions relatives, i comprendre les interaccions entre aquests grups funcionals.
- Estudiar la reactivitat i els mètodes d'obtenció de compostos orgànics que contenen fòsfor, sofre i silici.
- Dissenyar síntesis senzilles de compostos orgànics a partir dels productes de partida indicats i que impliquen seqüències sintètiques de fins a 5 etapes.
- 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.
- Conèixer els aspectes generals i les pautes mecanístiques bàsiques de les reaccions catalitzades per metalls de transició.
- Conèixer els aspectes generals i les pautes mecanístiques bàsiques de les reaccions pericícliques.



- Identificar els principals grups de productes naturals del metabolisme primari i secundari, i conèixer-ne la importància.

CONEIXEMENTS PREVIS

Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació

1108 - Grau de Química V1-2009 :

1110 - Grau de Química V2-2018 :

1929 - Programa de doble Grau Física-Química :

1934 - Programa de doble Grau Química-Enginyeria Química_2023 :

R4-OBLIGACIÓ D'HAVER SUPERAT PRÈVIAMENT L'ASSIGNATURA

34183 - Química general I

34184 - Química general II

34183 - Química general I

34184 - Química general II

34183 - Química general I

34184 - Química general II

34183 - Química general I

34184 - Química general II

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 Química orgànica II, on l'estructura i reactivitat dels grups funcionals ja vistos és important per entendre els sistemes més complexos que s'estudien aquí. És fonamental també que s'afermen els coneixements de nomenclatura i representació dels compostos orgànics, incloses també les seues 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 públic 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.
- Adquirir una sensibilitat permanent per la qualitat i el medi ambient, el desenvolupament sostenible i la prevenció de riscos laborals.
- 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 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.
- Reconeixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.
- Avaluar, interpretar i sintetitzar les dades i la informació Química.
- Reconeixer 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'arreglar 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 puguin 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'APRENTATGE

- Demostrar coneixement dels aspectes principals de terminologia i la nomenclatura orgànica.
- Comprendre les propietats estructurals i la reactivitat dels compostos i dels grups funcionals orgànics i saber aplicar-los a la solució de problemes sintètics i estructurals.
- Elucidar l'estructura de compostos orgànics senzills fent servir tècniques espectroscòpiques
- Explicar de manera comprensible fenòmens i processos relacionats amb la química orgànica.
- Adquirir i utilitzar informació bibliogràfica i tècnica referida als compostos orgànics.
- Escriure i exposar correctament en la llengua nativa.
- Realitzar eficaçment les tasques assignades com a membre d'un equip amb perspectiva de gènere.
- Demostrar coneixement de metodologies sostenibles en química orgànica.
- Demostrar raonament crític.
- Demostrar aprenentatge autònom.
- Resoldre problemes amb rigor.
- Demostrar una conducta ètica i responsable en l'exercici del seu treball professional, valors que són transmesos pels docents i investigadors de la Universitat, com a generadora i transmissora del coneixement científic.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Compostos carbonílics insaturats.

Compostos carbonílics insaturats. Estabilitat addicional dels compostos carbonílics ,-insaturats respecte als no conjugats. Reaccions dels compostos carbonílics ,-insaturats: addicions 1,2 (addició directa) i 1,4 (addició conjugada o addició de Michael). Factors que controlen l'addició conjugada. Condicions de reacció: control cinètic vs. control termodinàmic. Naturalesa del compost carbonílic ,-insaturat. Naturalesa del nucleòfil: nucleòfils durs o blans. Addició de nucleòfils heteroatòmics. Addicions conjugades de nucleòfils de carboni. Addició de compostos organometàl·lics: organolítics, organomagnesians i organocuprats. Principi de vinologia. Reaccions de substitució conjugada. Epoxidació nucleofílica. Addició d'anions enolat. Reacció danulació de Robinson. Reaccions conjugades



d'altres alquens electrònicament deficients.

2. Compostos de sofre, silici i fòsfor.

Propietats, preparació i reactivitat de les principals funcions orgàniques amb fòsfor: fosfines i sals de fosfoni, fosfats i fosfonats. Ilurs de fòsfor. Reacció d'olefinació de Wittig i reaccions relacionades. Propietats, preparació i reactivitat de les principals funcions orgàniques amb sofre: tioalcohols i tioèters, sulfòxids i sulfones, i àcids sulfònics. Anions estabilitzats per sofre: ilurs de sofre. Reaccions d'eliminació de sulfòxids. Reacció d'olefinació de Julia. Propietats, preparació i reactivitat de les principals funcions orgàniques amb silici. Substitució nucleofílica sobre silici. Grups protectors basats en silici. Estabilització de carbanions per silici. Reacció d'olefinació de Peterson. Estabilització de carbocations per silici. Reactivitat d'aril silans, vinyl silans i al·lil silans. Aplicacions sintètiques.

3. Anàlisi retrosintètica

Desconnexió retrosintètica. Concepte de sintó: reactius idealitzats. Estratègies fonamentals de desconnexió. Desconnexions CHeteroàtom. Síntesi de diverses etapes: el problema de la quimioselectivitat. Protecció de grups funcionals. Interconversió de grups funcionals. Desconnexions que impliquen dos grups funcionals: desconnexions 1,2, desconnexions 1,3. Desconnexions CC: desconnexions 1,1 CC, desconnexions 1,2 CC. Sintons dadors i acceptors. Desconnexions CC de dos grups funcionals: compostos 1,3-difuncionalitzats, compostos 1,5-difuncionalitzats. 'Reactivitat natural' i 'umpolung'.

4. Compostos heterocíclics aromàtics: estructura i reactivitat.

Tipus de compostos heterocíclics. Nomenclatura dels compostos heterocíclics. Heterocicles saturats i aromàtics més importants. Heterocicles aromàtics de sis baules: piridina. Reactivitat de la piridina: reaccions del nitrogen piridínic, reaccions per les posicions carbonades. Derivats de piridina: piridines, N-òxids de piridina. Heterocicles aromàtics de sis baules amb més d'un heteroàtom: diazines. Heterocicles aromàtics de cinc baules: pirrole, furà i tiofè. Reactivitat dels heterocicles pentagonals. Heterocicles de cinc membres amb més d'un àtom de nitrogen: azoles. Heterocicles benzofusionats. Benzopiridines: quinolina i isoquinolina. Heterocicles de cinc baules fusionats a benzè: indole. Principals estratègies per a la síntesi dheterocicles aromàtics: modificació d'anells existents, construcció de l'anell heterocíclic mitjançant reaccions iòniques, construcció de l'anell heterocíclic per cicloaddicions. Anàlisi retrosintètic en la síntesi dheterocicles: desconnexió d'enllaços carboni-heteroàtom. Pirroles, tiofens i furans a partir de compostos de 1,4-dicarbonílics. Síntesi de Hantzsch de piridines. Altres síntesis de piridines: Síntesi de Guareschi. Síntesi de pirazoles i piridazines a partir de compostos dicarbonílics i hidrazina. Síntesi de pirimidines a partir de compostos 1,3-dicarbonílics i amidines. Síntesi d'azoles. Síntesi de quinolines i isoquinolines. La síntesi d'indoles de Fischer.



5. Reactius organometàl·lics de metalls de transició.

Espècies organometàl·lics de metalls de transició: aspectes generals, hapticitat. La regla dels 18 electrons. Lenllaç en els complexos de metalls de transició. Pautes mecanístiques bàsiques dels complexos organometàl·lics. Bescanvi de lligands. Addició oxidant i eliminació reductora. Inserció migratòria. Transmetal·lació. Metalls de transició en síntesi orgànica: processos catalítics. Reaccions dels organometàl·lics de pal·ladi. Reaccions a través de complexos : reaccions d'acoblament d'halurs amb alquens (reaccions de Heck) i alquins (reacció de Sonogashira); Reaccions d'acoblament d'halurs amb organometàl·lics (reaccions de Negishi, Suzuki i Stille); Reaccions d'acoblament amb amines (reaccions de Buchwald-Hartwig). Reaccions a través de complexos : addició nucleofílica a complexos d'alquè-pal·ladi (reacció de Wacker). Reaccions a través de complexos -al·lil: addició nucleofílica a complexos de 3-al·lil pal·ladi (reaccions de substitució al·lílica). Reaccions a través de complexos acilo-pal·ladi: reaccions de carbonilació.

6. Reaccions pericícliques

Reaccions iòniques vs. pericícliques. Orbitals moleculars de sistemes conjugats. Control de les reaccions pericícliques pels orbitals moleculars frontera. Reaccions electrocícliques. Estereoquímica de les reaccions tèrmiques electrocícliques. Reaccions electrocícliques fotoquímiques. Reaccions de cicloaddició: cicloaddicions [2+2] i [4+2]. Estereoquímica de les reaccions de cicloaddició. Reordenaments sigmatròpics. Alguns exemples de reordenaments sigmatròpics. Resum de les regles per a les reaccions pericícliques.

7. Productes Naturals

Introducció: metabòlits primaris i secundaris. Metabòlits primaris: Carbohidrats. Classificació. Monosacàrids i representació de l'estereoquímica. Formes cícliques dels monosacàrids. Estructura de la glucosa. Carboni anomèric i unió glicosídica. Disacàrids i polisacàrids. Aminoàcids. Pèptids i proteïnes. Síntesi de pèptids. Estructura de les proteïnes. Enzims i co-enzims. Àcids nucleics: Composició i estructura. Metabòlits secundaris: Ceres, greixos i olis. Sabons. Prostaglandines. Terpenoides. Esteroides.

**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 manera següent:

- **Classes de teoria i problemes.** Les classes de teoria es dediquen a exposar als estudiants els aspectes més fonamentals de la matèria. En les classes de problemes es du a terme l'aplicació específica dels coneixements que els estudiants han adquirit en les classes de teoria. Els estudiants han d'haver treballat prèviament els problemes que s'han de resoldre a classe. La resolució d'aquests problemes es discuteix a la classe entre el professor i els alumnes. Totes aquestes classes es complementen amb el temps d'estudi personal.
- **Tutories.** S'hi avalua el procés global d'aprenentatge dels estudiants. En les sessions de tutoria es poden arreplegar els treballs que el professor haja encomanat als alumnes. Igualment, les tutories serveixen per resoldre els dubtes que hagen pogut sorgir al llarg de les classes i orientar els estudiants sobre els mètodes de treball més convenients per a la resolució dels problemes que se'ls presenten.
- **Seminaris-conferències:** Els seminaris-conferències versen sobre aspectes complementaris de la seua formació en química orgànica. Un especialista presentarà un tema rellevant de química actual. Per a aquesta tasca, els estudiants han d'assistir a l'acte i respondre a un qüestionari preparat pel professor.

AVALUACIÓ

Per a l'avaluació de l'aprenentatge el professor pot fer servir dues modalitats. L'estudiant n'ha d'optar per una, **que ha de comunicar per escrit a la Secretaria del Departament, segons el model disponible, durant el primer mes després de començar el quadrimestre.** Per qüestions de programació del professor, si no es comunica la decisió durant aquest període, l'estudiant serà avaluat amb la modalitat B. La qualificació global mínima per aprovar l'assignatura en qualsevol modalitat és de 5 punts sobre 10.

PRIMERA CONVOCATÒRIA**Modalitat A**

Avaluació contínua al llarg del curs. En aquest cas es tindran en compte els apartats següents:

1. Avaluació directa del professor (5 %): En aquesta avaluació es podran tenir en compte diferents aspectes, entre els quals cal destacar:

Assistència i participació raonada i clara en les discussions i preguntes plantejades.

Progrés en l'ús del llenguatge propi de la química orgànica.

Resolució de problemes i plantejament de dubtes.

Esperit crític.



2. Tutories i seminaris-conferències (globalment 15 %): En la nota de cada estudiant en aquest apartat es podran tenir en consideració els aspectes següents:

Assistència.

Contingut i presentació per escrit dels exercicis proposats pel professor a cada subgrup de treball (si és el cas).

Participació raonada i clara en les discussions plantejades.

3. Examen (80 %): L'examen es realitzarà en la data indicada per la Facultat i serà comú a tots els grups de l'assignatura. Constarà de preguntes teòriques i pràctiques relacionades amb la matèria explicada durant el període docent. Per assolir l'aprobat global de l'assignatura cal necessàriament haver obtingut en l'examen una puntuació mínima de 5 punts sobre els 10 totals de l'examen.

Modalitat B

L'avaluació es farà únicament amb un examen escrit sobre els continguts de l'assignatura tractats en les classes de teoria, les tutories i els seminaris. Amb aquest examen el professor podrà avaluar si l'estudiant ha adquirit les competències i els coneixements relacionats amb l'assignatura. Aquest examen representa el 100 % de la qualificació global.

L'examen es realitzarà en la data indicada per la Facultat i serà comú a tots els grups de l'assignatura. En aquesta modalitat, el professor podrà tenir en compte la participació de l'alumnat en les classes de teoria, tutoria i seminaris en la nota final.

SEGONA CONVOCATÒRIA

En l'avaluació de la segona convocatòria, es mantindrà, per als estudiants que hagen triat la modalitat A, la qualificació obtinguda en els apartats 1 i 2 d'aquesta modalitat i s'avaluarà de nou la part corresponent a l'apartat 3.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- CLAYDEN, J.; GREEVES, N.; WARREN, S. Organic Chemistry, 2 Ed., Oxford University Press: Oxford, 2012. Disponible en formato papel y electrónico en la biblioteca.
- McMURRY, J. Organic Chemistry, 9 Ed., Cengage Learning, 2016. Disponible en formato electrónico en la biblioteca.
- CLAYDEN, J.; WARREN, S. Solutions manual to accompany Organic Chemistry, 2 Ed., Oxford University Press: Oxford, 2013. Disponible en formato papel en la biblioteca.
- BRUCE, P. Y. Química Orgánica, 5 Ed., Pearson Prentice Hall, 2008. Disponible en formato papel y electrónico en la biblioteca.



- WADE, L. G. Química Orgánica, 9 Ed., Pearson Prentice Hall, 2017. Disponible en formato electrónico en la biblioteca.
- WADE, L. G. Química Orgánica, 7 Ed., Pearson Prentice Hall, 2012. Disponible en formato papel y electrónico en la biblioteca.
- VOLLHARDT, K. P. C. Química Orgánica Estructura y Función, 5 Ed., Ediciones Omega, 2007. Disponible en formato papel en la biblioteca.
- ChemBioOffice Ultra, Perkin Elmer (CambridgeSoft) Amplia selección de aplicaciones y funcionalidades que permite a químicos y biólogos dibujar, formular, modelar y editar estructuras moleculares químicas y biológicas así como simular espectros de RMN de protón y carbono.

Complementàries

- CAREY, F. A.; SUNDBERG, R. J. Advanced Organic Chemistry, 4 Ed., Plenum Press, 2000.
- CARROLL, F. A. Perspectives on Structure and Mechanism in Organic Chemistry, Brooks/Cole Publishing Company, 1998.
- WARREN, S.; WYATT, P. Organic Synthesis. The Disconnection Approach, 2 Ed., John Wiley and Sons, 2009.
- SMITH, M. B. Organic Synthesis, 2 Ed. Mc Graw Hill Higher Education, 2002.
- CARDÀ, M.; MARCO, J. A.; MURGA, J.; FALOMIR, E. Análisis retrosintético y síntesis orgánica. Resolución de ejemplos prácticos, Publicacions de la Universitat Jaume I: Castellón, 2010.
- JOULE, J. A.; MILLS, K. Mills, Heterocyclic Chemistry, 4 Ed., Blackwell Publishing, 2003.
- MARCO, J. A. Química de los Productos Naturales, Editorial Síntesis: Madrid, 2006.