FITXA IDENTIFICATIVA

Dades de l'Assignatura

Codi	34223
Nom	Química orgànica fina
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2015 - 2016

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1108 - Grau de Química	Facultat de Química	4	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1108 - Grau de Química	17 - Química Orgànica Aplicada	Optativa

Coordinació

Nom	Departament
FUSTERO LARDIES, SANTOS	325 - Química Orgànica

RESUM

La Química Orgànica és la branca de la química que estudia l'estructura i la reactivitat dels compostos del carboni, generalment coneguts com a molècules orgàniques. Entre estes molècules es troben la major part dels compostos essencials per a la vida, com ara lípids, carbohidratos, aminoàcids, proteïnes i àcids nucleics. També són molècules orgàniques moltes substàncies amb què entrem en contacte directament, com ara combustibles, pegaments, pintures o fibres tèxtils. Un gran grup de compostos orgànics són aquells que posseïxen activitat farmacològica i que són la base dels medicaments. Pesticides, fertilitzants i herbicides han canviat l'agricultura i els conservants han contribuït a modificar els nostres hàbits alimentaris. Ara bé, no tots els compostos orgànics són beneficiosos; hi ha molts d'ells que són danyosos bé per a la salut o per al medi ambient i per això, és necessari continuar preparant compostos amb millors propietats que substituïsquen als que presenten problemes. El coneixement de l'estructura i reactivitat dels compostos orgànics té la finalitat d'obrir camins per a la preparació de compostos que mantinguen totes les seues característiques beneficioses minimitzant els efectes secundaris indesitjables. L'assignatura optativa Química Orgànica Fina està plantejada com una continuació i expansió dels coneixements adquirits en les assignatures de Química Orgànica I, II i III. Els objectius que es pretén que l'estudiant aconseguisca després de cursar l'assignatura es poden resumir en els punts següents:

- Percebre els canvis estructurals que es produïxen en les molècules després de l'aplicació individual de cada una de les reaccions estudiades en assignatures anteriors.
- Percebre els canvis estructurals que es produïxen en les molècules després de l'aplicació seqüencial de dos o més de les reaccions estudiades en assignatures anteriors.
- Combinar seqüències de reaccions sintètiques orgàniques cara a la consecució d'una modificació estructural determinada.
- Analitzar les síntesis orgàniques partint dels compostos finals en seqüència inversa (anàlisi retrosintético) .
- Percebre les relacions existents entre els diversos grups funcionals d'una molècula objectiu com un element clau de l'anàlisi retrosintético. Percebre els aspectes estereoquímicos de la molècula objectiu com un element clau de l'anàlisi.
- Identificar els aspectes relacionats amb la selectivitat en síntesi orgànica.
- Dissenyar síntesi de compostos orgànics d'alt valor afegit a partir de determinats productes de partida accessibles en seqüències que impliquen diverses reaccions.
- Percebre els aspectes pràctics addicionals que ha de tindre en compte el químic de la indústria a l'hora de dissenyar síntesi a gran escala de compostos d'alt valor afegit.
- En relació a este últim aspecte, tindre en consideració els principis de la "química verde"

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

Els dits coneixements han de donar lloc a què l'estudiant siga capaç de:

Representar de forma clara i adequada l'estructura dels compostos i els seus enllaços, distingint entre fórmula empírica, fórmula molecular i fórmula desenrotllada.

Identificar els diferents grups funcionals en les molècules orgàniques.

Anomenar i formular compostos orgànics senzills: hidrocarburs (alcanos, alquenos, alquinos i aromàtics) , derivats halogenados, compostos amb oxigen (alcohols, èters, aldehids, zetasses, àcid

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 capacitat de treball en equip incloent equips de caràcter interdisciplinari i en un context internacional.
- Comprometre's amb l'ètica, els valors d'igualtat i la responsabilitat social com a ciutadà i com professional.
- Adquirir una sensibilitat permanent per la qualitat i el medi ambient, el desenvolupament sostenible i la prevenció de riscos laborals.
- Demostrar que reconeix els elements químics i els seus compostos: obtenció, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions.
- Relacionar les propietats macroscòpiques i propietats d'àtoms i molècules individuals, incloent-hi macromolècules (naturals i sintètiques), polímers, col·loides i altres materials.
- Demostrar que coneix l'estructura i la reactivitat de les classes principals de biomolècules i la química dels processos biològics principals.
- Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.
- Avaluar, interpretar i sintetitzar les dades i la informació Química.
- Dur a terme procediments experimentals estàndards interessats en treballs analítics i sintètics, en relació amb sistemes orgànics i inorgànics.
- Relacionar teoria i experimentació.
- Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.
- Desenvolupar metodologies sostenibles i respectuoses amb el medi ambient.
- 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 Aplicar els coneixements de química orgànica bàsica al disseny i preparació selectiva de compostos d'alt valor afegit. (CG3, CG10, CE7, CE12, CE18, CE22.

2 Conéixer l'interés i la incidència dels productes naturals i productes obtinguts per mitjà de química fina en els distints àmbits de la vida quotidiana. CE11, CE12, CE18, CE22, CE23.

3 Saber valorar la importància dels aspectes estereoquímicos dels productes estudiats tant en la seua síntesi com en la seua aplicació pràctica. CE12, CE18, CE22

4 Saber adquirir, utilitzar i transmetre informació bibliogràfica referida als compostos orgànics. CT1, CE7, CT3.

9 Adquirir una visió global de la indústria química orgànica CE15

10 Conéixer els principals compostos orgànics d'interés industrial CE7, CE11

11 Comprendre com es preparen els compostos orgànics a partir de les seues fonts primàries CE7, CE11

12 Avaluar els problemes relacionats amb l'escalat i sostenibilitat de les reaccions de preparació de compostos d'alt valor afegit CG6, CG10, CE25

13 Percebre la química sostenible com una forma viable per a desenvolupar la química actualment CG6, CG10, CE25

14 Saber organitzar i planificar tasques CG3

15 Treballar en equip amb un comportament seriós i professional i amb perspectiva de gènere CG5

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Quimioselectivitat i grups protectors

Quimioselectivitat. Definició i aplicacions. Reactivitat enfront de nucleòfils. Agents reductors. Transferència d'hidrurs. Hidrogenació catalítica. Hidrogenólisis. Metalls en dissolució. Selectivitat en reaccions d'oxidació. Quimioselectivitat en reaccions de dianions. Quimioselectivitat cinètica. Ús de grups protectors: importància i selecció. Classificació. Síntesi de pèptids.

2. Interconversión de grupos funcionales. Análisis retrosintético

Estratègies fonamentals en anàlisi retrosintètica. Sintones. Estratègies basades en la interconversió de grups funcionals. Desconnexions d'enllaços carboni-heteroàtom: desconnexions 1,2-Dix i 1,3-Dix. Síntesi de funcions amb enllaços simples (alcohols, amines, etc.)

3. Desconnexions de grups funcionals.

Estratègies basades en la desconnexió de grups funcionals. Desconnexions d'enllaços C-C. Desconnexions de sistemes aromàtics. Desconnexions 1,1 C-C: ús de reactius organometàl·lics. Desconnexions d'enllaços múltiples carboni-carboni. Desconnexions 1,3 i 1,5 de dos grups. Reactivitat natural i concepte de Umpolung. Desconnexions 1,2 i 1,4 de dos grups.

4. Diastereoselectivitat

Diastereoselectivitat: Definicions. Reaccions estereoselectives. Proquiralidad. Enantiotopicidad vs diastereotopicidad. Regla de Cram. Model de Felkin-Ahn. L'efecte dels àtoms electronegatius. Quelació, velocitat i estereoselectivitat. Reaccions estereoselectives d'alquens acíclics. El model de Houk. Epoxidació estereoselectiva. Alquilació estereoselectiva d'enolats. Diastereoselectivitat en reaccions aldòliques. Síntesi d'enantiòmers a partir de reaccions diastereoselectivas.

5. Síntesi asimètrica

Natura és asimètrica ?. El "pool" quiral. Resolució. Auxiliars quirals. Alquilació d'enolats. Excés enantiomèric. Reactius quirals. Catàlisi asimètrica. Hidrogenació d'alquens per catàlisi asimètrica. Catàlisi asimètrica vs catàlisi controlada per l'auxiliar. Epoxidació asimètrica: Exemples. Dihidroxilació asimètrica. Creació asimètrica d'enllaços C-C. Addició conjugada asimètrica. Organocatàlisi: Exemples. Reaccions aldòliques asimètriques. Reaccions catalitzades per enzims.

6. Síntesi a escala industrial. Escalat de procesos.

Consideracions pràctiques en els processos a escala gran. Selecció de rutes i reactius. Selecció de dissolvents. Optimització. Purificació de productes finals. Exemple de síntesi de compostos d'alt valor afegit: plaguicides, fàrmacs, colorants, etc.

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 podran disposar del material pedagògic corresponent al curs.
- Classes teòriques. - Es dedicaran a exposar als estudiants els aspectes més fonamentals de la matèria. Aquestes classes es complementen amb el temps d'estudi personal.
- Classes de problemes. - En aquestes classes es durà a terme l'aplicació específica dels coneixements que els estudiants hagin adquirit en les classes de teoria. Els estudiants prèviament hauran, treballat els problemes que es resoldran. La resolució d'aquests problemes es durà a terme en algunes ocasions pel professor i en altres casos pels alumnes bé en grup, bé de forma individualitzada.
- Tutories. - Se repartiran uniformement al llarg del curs, sent d'1 hora la durada de cadascuna d'aquestes sessions. En elles, el professor avaluarà el procés global d'aprenentatge dels estudiants, als quals es podrà organitzar prèviament en subgrups de treball. En les sessions de tutoria es podran arreplegar els treballs que hagin estat encomanats pel professor als esmentats subgrups. Igualment, les tutories serviran per resoldre tots els dubtes que hagin 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 puguin presentar.

Seminaris de Química Orgànica. - Es duran a terme al llarg del semestre, en les dates que apareixeran recollides en el calendari del curs. Aquests seminaris seran dedicats a una discussió més profunda de temes el contingut fa convenient un estudi més detallat: aplicacions de les tècniques d'espectroscòpia IR i RMN. Després de la discussió de cada tema es durà a terme la resolució d'alguns problemes pràctics relacionats amb el tema tractat.

AVALUACIÓ

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

1. **Avaluació directa del professor** (1 punt): 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.
- Esperit crític.

1. **Seminaris de Química Orgànica i Tutories** (globalment 2 punts): La nota de cada estudiant en aquest apartat tindrà en consideració:

- Assistència.
- Contingut i presentació per escrit dels exercicis encomanats pel professor a cada subgrup de treball. La qualificació serà una nota global per al subgrup i es computarà de la mateixa manera a cada membre d'aquest.

Per rebre qualificació en aquest apartat, caldrà haver assistit a un mínim de 4 seminaris i 6 tutories.

1. **Exàmens** (7 punts): 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 d'aquesta. L'aprovat global en l'assignatura portarà necessàriament implicat l'haver obtingut en l'examen una puntuació mínima de 3 punts sobre els 7 totals.
   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 la primera convocatòria i es procedirà a avaluar de nou la part corresponent al Punt 3 - "Exàmens".

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

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

REFERÈNCIES

Bàsiques

- Corey E. J., Cheng X. M., The Logic of Chemical Synthesis, John Wiley and Sons (1989).
- Clayden J., Greeves N., Warren S., Wothers P., Organic Chemistry, Oxford University Press (2001), Caps. 30-34.
- Wyatt P., Warren S. Workbook for Organic Synthesis. Strategy and Control, John Wiley and Sons (2008).

- Carda 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).
- Cabri W., di Fabio R., From Bench to Market. The Evolution of Chemical Synthesis, Oxford University Press (2000).
- Anderson N. G., Practical Process Research and Development (2ª edición), Elsevier (2012).

Complementàries

- Lee S., Robinson G., Process Development. Fine Chemicals from Grams to Kilograms, Oxford Science Publications (1995).
- Saunders J., Top Drugs. Top Synthetic Routes, Oxford Science Publications (2000).