FITXA IDENTIFICATIVA

Dades de l'Assignatura

Codi	34223
Nom	Química orgànica fina
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2023 - 2024

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1110 - Grau de Química V2-2018	Facultat de Química	4	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1110 - Grau de Química V2-2018	17 - Química Orgànica Aplicada	Optativa

Coordinació

Nom	Departament
BLAY LLINARES, GONZALO	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.
- Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.
- 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

L'apartat anterior recull les competències contingudes en el document VERIFICA. En aquesta assignatura s'aborden part dels resultats d'aprenentatge de la matèria Química Orgànica Aplicada que permeten adquirir, tant coneixements específics de Química, com habilitats i competències cognitives i competències generals recomanades per l'EUROPEAN CHEMISTRY THEMATIC NETWORK (ECTN) per al *Chemistry* Eurobachelor® *Label.* A la següent taula es relacionen els resultats d'aprenentatge adquirits en l'assignatura de Química Orgànica Fina relacionats amb les competències del grau en Química.

CONEIXEMENTS ESPECÍFICS DE QUÍMICA	
El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:	
	Competències de l'assignatura Química orgànica Fina que contemplen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Principals aspectes de la terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.	Demostrar que coneix els aspectes principals de terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.(CE1)
Els principals tipus de reaccions químiques i les principals característiques associades a elles.	Demostrar que coneix els tipus principals de reacció química i les seues característiques principals associades.(CE4)
Les propietats dels compostos alifàtics, aromàtics, heterocíclics i organometàl·lics.	Demostrar que coneix els tipus principals de reacció química i les seues característiques principals associades.(CE4) Demostrar que reconeix els elements químics i els seus compostos: obtenció, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions.(CE7). Demostrar que coneix els principis, els procediments i les tècniques per a la determinació, la separació, la identificació i la caracterització de compostos químics. (CE8). Demostrar que coneix l'estructura i la reactivitat de les classes principals de biomolècules i la química dels processos biològics principals.(CE12).
Principals rutes sintètiques en química orgànica, que impliquen interconversions de grups funcionals i formació d'enllaços carboni-carboni i carboni-heteroàtom.	Demostrar que coneix els tipus principals de reacció química i les seues característiques principals associades.(CE4) Demostrar que reconeix els elements químics i els seus compostos: obtenció, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions.(CE7). Demostrar que coneix els principis, els procediments i les tècniques per a la determinació, la separació, la identificació i la caracterització de compostos químics. (CE8).

	Demostrar que coneix l'estructura i la reactivitat de les classes principals de biomolècules i la química dels processos biològics principals.(CE12).

COMPETÈNCIES I HABILITATS COGNITIVES	
El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:	
	Competències de l'assignatura Química orgànica Fina que contemplen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Capacitat per a demostrar coneixement i comprensió dels fets, conceptes, principis i teories fonamentals relacionades amb els temes esmentats anteriorment.	Demostrar el coneixement i la comprensió dels fets essencials, dels conceptes, dels principis i de les teories relacionades amb les àrees de la química.(CE13).
Capacitat per a aplicar aquest coneixement i comprensió a la solució de problemes comuns qualitatius i quantitatius.	Resoldre problemes qualitatius i quantitatius segons models desenvolupats prèviament.(CE14). Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.(CE15). Comprendre els aspectes qualitatius i quantitatius dels problemes químics.(CE24).
Competències per a presentar i argumentar temes científics de forma oral i escrita a una audiència especialitzada.	Relacionar la química amb altres disciplines.(CE26). Elaborar informes, peritacions i projectes industrials i ambientals en l'àmbit químic.(CE27). 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.(CG6). Que els estudiants puguen transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no

	especialitzat.(CB4).

COMPETÈNCIES GENERALS	
El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:	
	Competències de l'assignatura Química orgànica Fina que contemplen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Capacitat per a aplicar coneixement pràctic per a la resolució de problemes relacionats amb informació qualitativa i quantitativa.	Resoldre problemes de forma efectiva.(CG4). Resoldre problemes qualitatius i quantitatius segons models desenvolupats prèviament.(CE14). Relacionar teoria i experimentació.(CE22). Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.(CE23). Comprendre els aspectes qualitatius i quantitatius dels problemes químics.(CE24).
Competències de gestió de la informació, en relació a fonts primàries i secundàries, incloent recuperació d'informació a través de cerques on-line.	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.(CG6). Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda(CT2).
Habilitats relacionades amb la tecnologia de la informació tals com processador de textos, full de càlcul, registre i emmagatzematge de dades, ús d'internet relacionada amb les assignatures.	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.(CG6). Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda(CT2).

Competències de comunicació oral i escrita, en un dels principals idiomes europeus, a més de l'idioma del país d'origen.	Demostrar capacitat de treball en equip incloent equips de caràcter interdisciplinari i en un context internacional.(CG5). Comprometre's amb l'ètica, els valors d'igualtat i la responsabilitat social com a ciutadà i com professional.(CG7). Expressar-se correctament, tant en forma oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.(CT1). Que els estudiants puguen transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.(CB4). Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda(CT2).
Competències d'estudi necessàries per al desenvolupament professional. Aquestes inclouran l'habilitat de treballar de forma autònoma.	Demostrar capacitat de gestió i direcció, esperit emprenedor, iniciativa, creativitat, organització, planificació, control, lideratge, presa de decisions i negociació.(CG3). Demostrar capacitat de treball en equip incloent equips de caràcter interdisciplinari i en un context internacional.(CG5). Aprendre de forma autònoma.(CG8). Demostrar capacitat per a adaptar-se a situacions noves.(CG9). Que els estudiants hagen desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per a emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.(CB5).

En relació amb els Objectius de Desenvolupament Sostenible (ODS) en aquesta assignatura s'espera que els/les estudiants/es siguen capaços d'adquirir una sensibilitat especial per una gestió sostenible de l'aigua (ODS6), de les matèries primes i de les fonts d'energia (ODS 7) així com per un desenvolupament sostenible i compatible amb el medi ambient (ODSs 11, 12, 13, 14 i 15) i de dissenyar, seleccionar i/o desenvolupar productes i processos químics eficients (ODS 7) i que minimitzen el seu impacte sobre el medi ambient (ODSs 14 i 15), aprofiten matèries primeres alternatives i generen una menor quantitat de residus (ODS 11).

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 i de problemes. - Es dedicaran a exposar als estudiants els aspectes més fonamentals de la matèria. Aquestes classes es complementen amb el temps d'estudi personal. Algunes classes es dedicarán a la ressolució demostrativa de problemes per part del professor en interacció amb els alumnes.
- Tutories. - Es 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. Les tutories es dedicaran principalment a la resolució activa de problemes per part dels estudiants. Els estudiants prèviament hauran treballat els problemes que es resoldran i els exposarán en classe per a la seua discussió i correcció si s'escau. En les sesions de tutoria es podran programar controls que consistiran en la ressolució de problemes de forma individual amb el suport del material d'estudi que serán recollits i avaluats pel professor. També es podran plantejar problemes o altres activitats online per ser treballats autonomàment per l'estudiant. 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 puguen presentar
- Seminaris de Química Orgànica. Consistiran en la exposició i discussió per part d'una parella o grup d'alumnes d'un artículo en una revista científica relacionat amb la síntesi orgànica.

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 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.
- Esperit crític.

2. Tutories i seminaris (globalment 2 punts): La nota de cada estudiant en aquest apartat tindrà en consideració:

- Assistència y exposició de problemes i exercisis.
- Resolució de problemes i activitats d'aprenentatge autònom encomanades
- Exercisis de control
- Seminaris.

3.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. 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 - "Tutories i 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 i s'haurà de superar una puntuació de 5 sobre 10.

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.

Advertiment final La còpia o plagi manifest de qualsevol tasca que forma part de l'avaluació suposarà la impossibilitat de superar l'assignatura, sotmetent-se seguidament als procediments disciplinaris oportuns.

Cal tindre en compte que, d'acord amb l'article 13 d) de l'Estatut de l'Estudiant Universitari (RD 1791/2010, de 30 de desembre), "*és deure d'un estudiant abstindre's en la utilització o cooperació en procediments fraudulents en les proves d'avaluació, en els treballs que es realitzen o en documents oficials de la Universitat*".

REFERÈNCIES

Bàsiques

- COREY, E. J.; CHENG, X. M. The Logic of Chemical Synthesis, John Wiley and Sons, 1998.
- CLAYDEN, J.; GREEVES, N.; WARREN, S.; WOTHERS, P. Organic Chemistry, Oxford: 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, Castellón: Publicacions de la Universitat Jaume I, 2010.
- CABRI, W.; DI FABIO, R.; From Bench to Market. The Evolution of Chemical Synthesis, Oxford: Oxford University Press, 2000.
- ANDERSON, N. G. Practical Process Research and Development, 2 Ed., Elsevier, 2012.
- ChemBioOffice Ultra, PerkinElmer (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

- LEE, S.; ROBINSON, G. Process Development. Fine Chemicals from Grams to Kilograms, Oxford: Oxford Science Publications, 1995.
- SAUNDERS, J. Top Drugs. Top Synthetic Routes, Oxford: Oxford Science Publications, 2000.