

0/

Edifici de Farmàcia, 50 anys

Curs
2007-08



UNIVERSITAT DE BARCELONA



COMPLEMENTS DE QUÍMICA ORGÀNICA



Ensenyament de Ciència i
Tecnologia dels Aliments



Complements de Química Orgànica

- Codi 184808
- Curs 2007-2008
- Departament 5954200 Dept. Farmacologia i Química Terapèutica
- Crèdits 6

Recomanacions

Coneixements necessaris d'altres matèries:

- Química general
- Química inorgànica

Objectius

Referits a coneixements

- Establir les bases necessàries per a la comprensió dels principis bàsics que permeten d'entendre les propietats i el comportament dels compostos orgànics a escala molecular.
- Determinació de l'estructura dels compostos orgànics per mètodes espectroscòpics.
- Coneixement de les propietats físiques i químiques dels compostos orgànics mitjançant l'anàlisi de les característiques estructurals.
- Introducció a l'estereoquímica i a l'anàlisi conformacional de compostos orgànics.
- Racionalització de les propietats i la reactivitat dels compostos orgànics agrupats en famílies caracteritzades pels grups funcionals.
- Nomenclatura dels compostos orgànics.

Temari

1. Programa de classes teòriques

Tema 1. Introducció a la química orgànica

Els compostos orgànics: característiques. Enllaç iònic i covalent. El model d'enllaç de Lewis.

Composició de les molècules orgàniques. Fórmula empírica i fórmula molecular. Constitució. Concepte d'isomeria. Isòmers constitucionals.

Tema 2. Estructura i enllaç en les molècules orgàniques

Geometria de les molècules orgàniques: tetraèdrica, trigonal i lineal. Formes i energies dels orbitals

atòmics. Configuració electrònica de l'àtom de carboni: orbitals híbrids sp^3 , sp^2 i sp . Formació d'enllaços: orbitals moleculars. Longituds d'enllaç, angles d'enllaç i energies d'enllaç. Hibridació d'altres àtoms: nitrogen i oxigen.

Tema 3. Els compostos orgànics: propietats moleculars

Concepte de grup funcional. Nomenclatura dels compostos orgànics. Propietats físiques i estructura molecular. Efectes electrònics. Efectes inductius: polarització de l'enllaç covalent. Efectes ressonants: deslocalització electrònica. Molècules polars: moment dipolar. Interaccions no enllaçants entre molècules: forces intermoleculars. Punts de fusió i punts d'ebullició. Dissolvents. Solubilitat dels compostos orgànics. Acidesa i basicitat dels compostos orgànics.

Tema 4. Estereoisomeria

Quiralitat. Enantiòmers i carboni tetraèdric. Activitat òptica. Mescles racèmiques. Configuració absoluta: les regles seqüencials R-S. Estereoisomeria deguda a la presència de dos estereocentres: enantiòmers i diastereòmers. Compostos diastereòmers aquirals. Configuració absoluta dels dobles enllaços: nomenclatura E-Z. Compostos aquirals amb centres quirals: formes meso. Estereoisomeria deguda a la presència de més de dos estereocentres. Nombre total d'estereoisòmers d'un compost. Projeccions de Fischer. Nomenclatura eritro- i treo-. Resolució de racemats via sals diastereomèriques. Quiralitat i activitat biològica.

Tema 5. Alcans. Anàlisi conformacional

Alcans lineals, ramificats i cíclics. Propietats físiques dels alcans. Compostos acíclics: lliure gir. Conformació. Projeccions de Newman i fórmules de cavallet. Tensió de torsió i estèrica. Anàlisi conformacional dels alcans. Cicloalcans. Tensió angular. Estructura i conformacions del ciclohexà: formes de cadira i de bot. Enllaços axials i equatorials. Derivats disubstituïts del ciclohexà: estereoisomeria cis-trans.

Tema 6. Grups funcionals amb enllaços senzills carboni-heteroàtom

Compostos amb enllaços senzills C-halogen, C-oxigen, C-sofre i C-nitrogen. Estructura i propietats físiques. Acidesa dels alcohols, les amines i els tiols. Introducció a les reaccions orgàniques. Concepte de nucleòfil i electròfil. Mecanismes de les reaccions de substitució nucleòfila i d'eliminació. Reaccions a partir d'haloalcans. Reaccions a partir d'alcohols i derivats. Èters cíclics: tensió angular dels epòxids. Derivats de sofre: tiols i sulfurs. Basicitat de les amines. Separació de compostos orgànics segons les propietats àcid-base. Reaccions de les amines com a nucleòfils. Oxidació d'alcohols i dels derivats de sofre. Oxidació d'amines. Nitrosació d'amines.

Tema 7. Alquens i alquins

Estructura electrònica dels alquens i dels alquins. Isomeria geomètrica. Cicloalquens. Propietats físiques. Estabilitats relatives dels alquens. Hidrogenació catalítica d'alquens. Reaccions d'addició

electròfila dels alquens. Regioselectivitat i estereoselectivitat. Oxidació d'alquens. Reaccions dels alquins. Acidesa dels alquins terminals.

Tema 8. Compostos aromàtics

Estructura orbitària del benzè. Energia de ressonància: estabilitat dels sistemes aromàtics. Aromaticitat: regla de Hückel. Hidrocarburs benzènics policíclics. Reaccions de substitució electròfila aromàtica. Fenols i anilines. Heterocicles aromàtics: furan, tiofè, pirrole i piridina. Acidesa del pirrole. Basicitat i nucleofilia de la piridina. Benzoderivats: indole, quinolina i isoquinolina. Heterocicles aromàtics amb més d'un heteroàtom.

Tema 9. Compostos carbonílics. Aldehids i cetones

Tipus de compostos carbonílics. Estructura electrònica dels derivats carbonílics. Propietats físiques dels aldehids i les cetones. Basicitat de l'oxigen carbonílic. Reaccions d'addició nucleòfila. Formació d'hemiacetals i d'acetals. Carbohidrats: formació d'hemiacetals cíclics. El carboni anomèric. Projeccions de Fischer modificades, projeccions de Haworth i formes de cadira. Glicòsids. Disacàrids. Altres reaccions d'addició nucleòfila. Imines. Reaccions de reducció. Oxidació d'aldehids. Acidesa dels àtoms d'hidrogen en posició alfa. Tautomeria cetoenòlica. Condensació aldòlica.

Tema 10. Àcids carboxílics i derivats: èsters, amides i nitrils

Estructura i propietats físiques dels èsters i les amides. Acidesa i basicitat. Altres derivats dels àcids carboxílics. Reactivitat dels àcids carboxílics i derivats: reaccions d'addició-eliminació. Formació de clorurs d'àcid i anhídrids. Preparació i hidròlisi d'èsters. Transesterificació. Preparació i hidròlisi d'amides. Reducció d'èsters i amides. Nitrils: estructura electrònica i propietats físiques. Hidròlisi de nitrils. Acidesa dels àtoms d'hidrogen en posició alfa dels èsters. Condensació de Claisen. Importància dels èsters en els sistemes biològics: glicèrids i ceres. Èsters i anhídrids derivats de l'àcid fosfòric. Aminoàcids, pèptids i proteïnes.

2. Programa de seminaris

1. Nomenclatura dels compostos orgànics
2. Determinació estructural de compostos orgànics per mètodes espectroscòpics



Metodologia

Les classes teòriques seran de tipus magistral. Tanmateix, la discussió de qüestions serà promoguda pel professorat i a instància de qualsevol alumne.

Conjuntament amb les classes teòriques s'impartiran classes dedicades a introduir l'alumnat en les regles bàsiques de nomenclatura dels compostos orgànics i en les tècniques espectroscòpiques convencionals per caracteritzar-los. Aquestes classes, complementàries i de suport als continguts explicats a les classes teòriques, seran actives, amb participació directa de l'alumnat.

L'objectiu de les classes pràctiques, en què es faran treballs experimentals, és introduir l'alumnat en les tècniques de laboratori.

PROGRAMACIÓ TEMPORAL DEL TEMARI AL LLARG DEL SEMESTRE

- Classes teòriques

Tema 1: 2 h

Tema 2: 2 h

Tema 3: 4 h

Tema 4: 4 h

Tema 5: 2 h

Tema 6: 6 h

Tema 7: 3 h

Tema 8: 3 h

Tema 9: 3 h

Tema 10: 3 h

- Seminaris (a partir de la segona setmana de curs)

Bloc 1: 5 h

Bloc 2: 5 h

- Classes pràctiques

Pràctica 1: 4 h (30 de novembre, de 9 a 13 h).

Pràctica 2: 3 h (2 de desembre, de 10 a 13 h).

Pràctica 3: 3 h (3 de desembre, de 10 a 13 h).

PROGRAMACIÓ I UTILITZACIÓ DELS CRÈDITS NO PRESENCIALS

Es destinaran 8 hores no presencials a l'estudi i la resolució per part de l'alumne d'exercicis seleccionats relacionats amb tots els temes del programa de classes teòriques i seminaris.

Avaluació

L'avaluació de l'assignatura es durà a terme mitjançant tres proves de seguiment (20% del total) i un examen final (80% del total).

Les proves de seguiment es realitzaran de forma presencial dins de l'horari de classes i constaran de preguntes curtes sobre la matèria explicada a les classes teòriques i als seminaris. Es considerarà l'assistència a classe i la participació activa de l'alumne. La qualificació de les proves de seguiment es conservarà per a la segona convocatòria en les mateixes condicions que en la primera.

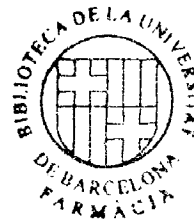
L'examen final constarà de 10 exercicis i/o preguntes curtes, d'un punt cada un, corresponents a la matèria explicada a les classes teòriques, als seminaris i a les classes pràctiques.

Avaluació única

Data màxima per acollir-se a l'avaluació única: 1 d'octubre

Distribució horària

| Tipus | Hores |
|-------------------------------------|------------|
| <i>Hores de treball dirigit</i> | 41 |
| <i>Hores d'aprenentatge autònom</i> | 58 |
| <i>Hores presencials</i> | 64 |
| Total | 163 |



Fonts d'informació bàsica

Llibres

Carey FA. Química orgànica. 6a ed. México: McGraw-Hill; 2006.

Ege S. Química orgànica: estructura y reactividad. Barcelona: Reverté; 1997.

IUPAC. Nomenclatura de la química orgànica. Madrid: Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Real Sociedad Española de Química; 1987.

IUPAC. Nomenclatura de química orgànica. Barcelona: Consell Superior d'Investigacions Científiques, Institut d'Estudis Catalans. Secció de Ciències; 1989.

McMurry J. Química orgànica. México: International Thomson; 2001.

Peterson WR. Formulación y nomenclatura química orgànica. 16a ed. Barcelona: EDUNSA; 1996.

Quiñoá E, Riguera R. Nomenclatura y representación de los compuestos orgánicos: una guía de estudio y autoevaluación. Madrid: McGraw-Hill/Interamericana de España; 1996.

Quiñoá E, Riguera R. Cuestiones y ejercicios de química orgànica: una guía de estudio y autoevaluación. 2a ed. Madrid: McGraw-Hill; 2004.

Sales i Cabré J, Vilarrasa J. Introducció a la nomenclatura química inorgànica i orgànica. 5a ed. Barcelona: Reverté; 2003.

Solomons TGW. Fundamentos de química orgànica. 2a ed. México: Limusa; 1999. [Actualment està disponible la 7a edició anglesa *Organic Chemistry*. New York: John Wiley & Sons: 1999].

Vollhardt KPC, Schore NE. Química orgànica: estructura y función. 3a ed. Barcelona: Omega; 2000.

Vollhardt KPC, Schore NE. Organic chemistry: structure and function. 5th ed. New York: Freeman; 2007.
Lloc Web d'acompanyament: <http://bcs.whfreeman.com/vollhardtschore5e>

Wade LG. Química orgànica. 5a ed. Madrid: Pearson Educación; 2004.