



0/

26



UNIVERSITAT DE BARCELONA



COMPLEMENTS DE QUÍMICA ORGÀNICA



Curs
2005-06

Ensenyament de Ciència
i Tecnologia dels Aliments

ENSENYAMENT DE CIÈNCIA I TECNOLOGIA DELS ALIMENTS

Pla docent

ASSIGNATURA: Complementes de Química Orgànica

1. CARACTERÍSTIQUES GENERALS:

- | | |
|--|--|
| a) Núm. de codi: | 184808 |
| b) Caràcter: | Complement de Formació |
| c) Semestre del curs acadèmic: | 1r |
| d) Semestre curricular: | 1r |
| e) Núm. de crèdits: | 6 (4 T + 2 P) |
| f) Àrea/es de coneixement que l'imparteixen: | Química Orgànica |
| g) Departament/s que l'imparteixen: | Farmacologia i Química Terapèutica |
| h) Coordinador: | Dra. Mercedes Amat Tusón |
| i) Professorat: | Dra. Mercedes Amat Tusón, Dra. Carmen Escolano Mirón |
| j) Llengua: | Castellà |

2. OBJECTIUS GENERALS:

Establir les bases necessàries per la comprensió dels principis bàsics que permeten entendre les propietats i el comportament dels compostos orgànics a nivell molecular.

3. OBJECTIUS ESPECÍFICS:

- Coneixement de les propietats físiques dels compostos orgànics mitjançant l'anàlisi de les seves característiques estructurals.
- Introducció a l'estereoquímica i a l'anàlisi conformacional de compostos orgànics.
- Racionalització de les propietats i reactivitat dels compostos orgànics agrupats en famílies caracteritzades pels grups funcionals.
- Determinació de l'estructura dels compostos orgànics per mètodes espectroscòpics.
- Nomenclatura dels compostos orgànics.

4. CONEIXEMENTS NECESSARIS D'ALTRES MATÈRIES:

- Química General
- Química Inorgànica.

5. METODOLOGIA DOCENT:

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

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

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

6. TEMARI

6.1. 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-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, amines i 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 en base a les seves 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 orbitalica 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: furà, tiofe, 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 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'hidrògen en posició α . Tautomeria ceto-enòlica. Condensació aldòlica.

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

Estructura i propietats físiques dels esters 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'esters. Transesterificació. Preparació i hidròlisi d'amides. Reducció d'esters i amides. Nitrils: estructura electrònica i propietats físiques. Hidròlisi de nitrils. Acidesa dels àtoms d'hidrògen en posició α dels esters. Condensació de Claisen. Importància dels esters en els sistemes biològics: glicèrids i ceres. Esters i anhídrids derivats de l'àcid fosfòric. Aminoàcids, pèptids i proteïnes.

6.2. Programa de seminaris.

1er bloc: Nomenclatura dels compostos orgànics.

2on bloc: Determinació estructural de compostos orgànics per mètodes espectroscòpics.

7. 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.

1er bloc: 5 hores.

2on bloc: 5 hores.

Classes pràctiques:

Pràctica 1: 4 hores (30 Nov. 9-13 h).

Pràctica 2: 3 hores (2 Des. 10-13 h).

Pràctica 3: 3 hores (3 Des. 10-13 h).

8. BIBLIOGRAFIA I ALTRES FONTS D'INFORMACIÓ:

Llibres bàsics de consulta:

*K. P. C. Vollhardt, N. E. Schore, "Química Orgánica: estructura y función", 3a edició, Edicions Omega: Barcelona, 2000.

*F. A. Carey, "Química Orgánica", 3a edició, McGraw-Hill: Madrid, 1999.

*J. McMurry, "Química Orgánica", 5a edició, International Thomson Editors: México, 2001.

*A. Streitwieser, C. H. Heathcock, "Química Orgánica", 3a edició, Interamericana: Madrid, 1987. Actualment està disponible la 4a edició anglesa "Introduction to Organic Chemistry", A. Streitwieser, C. H. Heathcock, E. M. Kosower, Prentice Hall: 1998.

*R. T. Morrison, R. N. Boyd, "Química Orgánica", 5a edició, Addison- Wesley Iberoamericana: Wilmington (USA), 1990. Actualment està disponible la 6a edició anglesa "Organic Chemistry", Prentice Hall: Englewood Cliffs (USA), 1992.

*T. G. W. Solomons, "Fundamentos de Química Orgánica", 2a edició, Limusa: México, 1995. Actualment està disponible la 7a edició anglesa "Organic Chemistry", T. G. W. Solomons, C. B. Fryhle, T. G. Solomons, John Wiley & Sons: 1999.

*J. L. Soto, "Química Orgánica. Vol. I: conceptos básicos", Ed. Síntesis S. A.: Madrid, 1999.

*J. L. Soto, "Química Orgánica. Vol. II: hidrocarburos y sus derivados halogenados", Ed. Síntesis S. A.: Madrid, 2001.

*S. Ege, "Química Orgánica: Estructura y reactividad", Reverté: Barcelona, 1997 (1er volum) i 1998 (2on volum).

*E. Quiñoá, R. Riguera, "Nomenclatura y representación de los compuestos orgánicos. Una guía de estudio y autoevaluación", McGraw-Hill: Madrid, 1996.

*W. R. Peterson, "Formulación y nomenclatura, Química Orgánica", 8a edició, Eunibar: Barcelona, 1986.

*J. Sales, J. Vilarrasa, "Introducció a la nomenclatura química inorgànica i orgànica", 4a edició, EDUNSA: Barcelona, 1994.

*IUPAC, "Nomenclatura de Química Orgánica", CSIC i RSEQ: Madrid, 1987.

*IUPAC, "Nomenclatura de Química Orgánica", Institut d'Estudis Catalans: Barcelona, 1989.

9. PROGRAMACIÓ I UTILITZACIÓ DELS CRÈDITS NO PRESENCIALS:

(*indicar possibles activitats: treballs, solució de casos, treball amb ordinador, proves d'autoavaluació, problemes seleccionats, etc.*)

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

10. AVALUACIÓ DE L'ESTUDIANT:

Es realitzarà un examen corresponent a la matèria explicada a les classes teòriques, als seminaris i a les classes pràctiques que constarà de 10 problemes d'un punt.

11. AVALUACIÓ DEL PROFESSOR I/O DE L'ASSIGNATURA:

Enquestes institucionals.

12. MATERIAL DOCENT QUE ES SUMINISTRA A L'ESTUDIANT:

Pla docent de l'assignatura
Esquemes de teoria fotocopiats
Col·leccions de problemes

13. ESTIMACIÓ DE LES HORES DE TREBALL QUE NECESSITA L'ESTUDIANT:

	Activitats presencials	Activitats dirigides	Treball individual	Total
Teoria	40	---	48	88
Laboratori	10	---	---	10
Seminaris	10	---	10	20
Treball individual	---	41 (*)	---	41
Avaluació	4	---	---	4

TOTAL = 163 h

(*) Cerca bibliogràfica (8 h) + preparació (2 x 100 fulls = 200 fulls) (200 fulls / 6 fulls per hora = 33). **Total = 41 h**

Crèdits Europeus ECTS = 163/25 = 6,52