



FACULTAT DE
FARMÀCIA

T/21



UNIVERSITAT DE BARCELONA

U

B



QUÍMICA ORGÀNICA I

Curs
2006-07

Ensenyament de Farmàcia



FACULTAT DE
FARMÀCIA

**ENSENYAMENT DE FARMÀCIA
PLA D'ESTUDIS -2002**

PLA DOCENT – CURS 2006-07

ASSIGNATURA		QUÍMICA ORGÀNICA I
DEPARTAMENT		Farmacologia i Química Terapèutica
ÀREA DE CONEIXEMENT		Química Orgànica
SEMESTRE DE DOCÈNCIA		1r semestre
CRÈDITS (TEÒRICS + PRÀCTICS)		6 cr. (4,5 T i 1,5 P)
TIPUS		Troncal
CRÈDITS ECTS	Hores d'activitat presencial	60 h
	Hores de treball dirigit	16 h
	Hores d'aprenentatge autònom	100 h
	Hores d'activitat d'avaluació	4 h
	Hores totals de treball de l'alumne/a	180 h

1. INTRODUCCIÓ

L'assignatura Química Orgànica I constitueix una introducció a la química orgànica. En el camp farmacèutic, el compost orgànic pur constitueix la base del medicament. Per comprendre'n el comportament a nivell molecular cal saber quines propietats i possibilitats de transformació té.

2. OBJECTIUS

L'objectiu general de l'assignatura és que l'alumnat assoleixi una formació bàsica en química orgànica, que caldrà que es manifesti en els coneixements específics següents:

CONEIXEMENTS

- Comprensió de la química dels derivats de carboni en el seu aspecte tridimensional: l'estructura d'un compost orgànic depèn de la composició, constitució, configuració i conformació.
- Coneixement de les propietats físiques dels compostos orgànics mitjançant l'anàlisi de les propietats dels enllaços i les forces intermoleculares.
- Racionalització de les propietats i la reactivitat bàsica dels compostos orgànics amb enllaços senzills.
- Coneixements generals sobre la implicació singular dels compostos orgànics en la consecució dels actuals nivells de benestar social.

Què ha de saber fer l'alumnat per assolir un nivell bàsic de química orgànica?

Els coneixements esmentats s'han de plasmar en els camps següents, en els quals l'alumnat ha de:

- Saber utilitzar les regles bàsiques de nomenclatura de la IUPAC de manera que sigui capaç d'anomenar i de formular molècules orgàniques de nivell molecular senzill.
- Saber emprar apropiadament els diferents termes estereoquímics, en particular els que es refereixen a l'estereoisomeria derivada de la presència de centres estereogènics.
- Comprendre l'estreta relació entre estructura i reactivitat. L'alumnat haurà d'adquirir un perfecte domini en les representacions de les formes ressonants de compostos i intermedis orgànics i saber-ne deduir la implicació en aspectes com ara la reactivitat, l'estabilitat termodinàmica i els mecanismes de reacció.
- Conèixer de manera precisa l'estructura, així com les propietats físiques i àcid-base associades a cada grup funcional.

- Saber representar les molècules orgàniques en les diferents projeccions (tridimensionals, de Newman i de Fischer). En relació amb aquest punt, ha d'aplicar els elements bàsics d'anàlisi conformacional, especialment en anells de sis membres i en casos de rotació a l'entorn d'enllaços senzills C—C en sistemes acíclics.
- Dominar la reactivitat bàsica dels grups funcionals amb enllaços senzills i els factors que la modulen i condicionen.

3. PROGRAMA

3.1 PROGRAMA DE CLASSES TEÒRIQUES

Bloc temàtic 1. Aspectes generals dels compostos orgànics

Tema 1. Introducció: química orgànica i nomenclatura. Química del carboni: introducció històrica i actualitat de la química orgànica. Tipus de fórmules. Constitució (connectivitat). Isomeria. Esquelet carbonat i grups funcionals. Fonaments de la nomenclatura IUPAC d'hidrocarburs i grups funcionals: arrel, prefixos, sufixos, multiplicadors i localitzadors.

Tema 2. Estructura i enllaç dels compostos orgànics I. Compostos iònics i covalents. Enllaç iònic i enllaç covalent. Estructures de Lewis. Càrregues formals. Orbitals atòmics. Orbitals moleculars. Enllaç σ i enllaç π . Orbitals híbrids: àtoms de carboni tetraèdrics. Altres àtoms amb hibridació sp^3 . L'enllaç covalent als alcans, alcohols, èters i amines. Àtoms de carboni trigonals. Hibridació sp^2 . L'enllaç covalent als alquens. L'enllaç covalent als compostos carbonílics. Molècules lineals: hibridació sp . L'enllaç covalent als alquins. L'enllaç covalent als nitrils. Geometria de les molècules orgàniques: geometria tetraèdrica, trigonal i lineal.

Tema 3. Estructura i enllaç dels compostos orgànics II. Hibridació d'orbitals i electronegativitat de l'àtom de carboni. Longituds dels enllaços covalents i la seva relació amb la hibridació. Força dels enllaços covalents: energies de dissociació i valors mitjans d'energia d'enllaç. Enllaços múltiples. Ressonància. Formes en resonància. Estructura del benzè. La polaritat de les molècules covalents. Efecte inductiu. Moments dipolars. Interaccions no enllaçants entre molècules: interaccions dipol-dipol, de Van der Waals i enllaços per pont d'hidrogen. Propietats físiques: punts d'ebullició i solubilitat. Exemples: haloalcans, alcohols, èters i amines.

Tema 4. Reaccions dels compostos orgànics com a àcids i com a bases. Àcids i bases de Brønsted i de Lewis. Reaccions dels compostos orgànics com a àcids i bases. L'ús de fletxes per descriure mecanismes. Acidesa dels enllaços C—H, N—H, O—H, etc. Acidesa i basicitat relatives al llarg d'un període de la taula periòdica. Acidesa i basicitat relatives dins un grup de la taula periòdica. Els cations orgànics com a àcids. Equilibris àcid-base. Constants d'acidesa i pK_a . Ús de les taules de valors de

pK_a en la predicció de les reaccions àcid-base. Efecte dels canvis estructurals sobre l'acidesa i la basicitat. Efectes ressonants i inductius. Estabilització de carbanions. Alcohols; ions alcòxid i oxoni. Alcohols i tiols: analogies i diferències en les seves propietats. *Amines*. Estructura i propietats físiques. Acidesa i basicitat. Ions amoni i amidur. Formació de sals. Sals d'amoni quaternari. Òxids d'amina. Amines d'interès biològic. Alcaloides.

Bloc temàtic 2. Estereoisomeria

Tema 5. Alcans. Anàlisi conformacional. Alcans lineals i ramificats. Sèrie homòloga. Grups alquil. Isòmers constitucionals. Estructura i propietats físiques dels alcans. Forces intermoleculars. Petrolí. Compostos acíclics: lliure gir. Conformació. Fórmules de cavallet i projeccions de Newman. Anàlisi conformacional dels alcans. Tensió torsional i estèrica.

Tema 6. Cicloalcans. Classificació. Estereoisomeria *cis/trans*. Tensions en els cicloalcans: calors de combustió. Tensió angular. Estructura i conformacions del ciclopropà, ciclobutà i ciclopentà. Ciclohexà: formes de cadira i de bot. Enllaços axials i equatorials. Derivats substituïts del ciclohexà. Cicloalcans superiors: anells mitjans i grans. Alcans bicíclics i policíclics. Decalina i esteroides.

Tema 7. Estereoisomeria. Molècules quirals: enantiòmers i racemats. Activitat òptica. Configuració absoluta: les regles seqüencials *R-S*. Projeccions de Fischer. Convenció de Fischer: *D, L*. Compostos amb centres quirals diferents del carboni. Molècules quirals sense centres quirals: al·lens. Quiralitat i interacció biològica. Estereoisomeria deguda a la presència de dos centres quirals: enantiòmers i diastereòmers. Formes *meso*. Nomenclatura *eritro-treo*. Estereoisomeria deguda a la presència de més de dos centres quirals. Epimers. Estereoisomeria *E/Z*. Resolució de racemats. Estereoisomeria i quiralitat en ciclohexans substituïts.

Bloc temàtic 3. Reactivitat de compostos orgànics amb enllaç senzill

Tema 8. Conceptes generals de les reaccions orgàniques. Equació estequiomètrica. Mecanisme de reacció. Mecanismes concertats o no concertats. Intermedis de reacció. Classificació de les reaccions orgàniques: reaccions heterolítiques (polars), homolítiques (radicalàries) i pericíclicues; processos d'addició, eliminació, substitució i transposició. Termodinàmica i cinètica de les reaccions orgàniques: repàs dels conceptes generals. Un exemple de reacció heterolítica: l'enllaç carboni-metall: *compostos organometàl·lics*. Comportament dels compostos organometàl·lics com a bases. Preparació de compostos organolítics i de Grignard. Un exemple de reacció radicalària: halogenació d'alcans. Radicals: estructura i estabilitat. Utilitat sintètica d'aquestes reaccions. Altres grups funcionals amb enllaç senzill:

Peròxids d'alquil. Disulfurs. Sulfurs i sals de sulfoni. Sulfòxids i sulfones. Compostos d'interès especial.

Tema 9. Reaccions de substitució nucleòfila I. *Haloalcans*: reacció de substitució nucleòfila. Concepte de *nucleòfil*, *electròfil* i *grup sortint*. Reacció de substitució nucleòfila bimolecular (S_N2): mecanisme i curs estereoquímic. Factors que influeixen en el mecanisme S_N2 : substrat, nucleòfil, grup sortint i dissolvent. Solvòlisi d'haloalcans terciaris: substitució nucleòfila monomolecular (S_N1): mecanisme i curs estereoquímic. Factors que influeixen en el mecanisme S_N1 : estabilitat de carbocacions i efecte del dissolvent. Transposicions. S_N1 enfront de S_N2 .

Tema 10. Reaccions de substitució nucleòfila II. Altres substrats anàlegs: *sulfonats d'alquil*. Utilitat sintètica de la reacció de substitució nucleòfila: síntesi d'èters de Williamson. Síntesi d'altres grups funcionals. Les amines com a nucleòfils. Els *alcohols* i *èters* com a substrats en reaccions de substitució nucleòfila: conversió en haloalcans i ruptura d'èters en medi àcid. Reaccions dels *epòxids*. Reaccions de substitució nucleòfila en bioquímica.

Tema 11. Reaccions d'eliminació. Reaccions d'eliminació dels *haloalcans*. Eliminació monomolecular (E1): mecanisme. Eliminació bimolecular (E2): mecanisme i curs estereoquímic. Regioselectivitat i estereoselectivitat. Competència substitució-eliminació. Reaccions d'eliminació de compostos relacionats: *sulfonats*. *Sals d'amoní*: eliminació de Hofmann. Deshidratació d'alcohols. Altres eliminacions: *N-òxids* i *sulfòxids*.

3.1. PROGRAMA DE CLASSES PRÀCTIQUES (SEMINARIS)

Resolució d'exercicis i problemes referents a:

1. Nomenclatura bàsica dels compostos orgànics.
2. Estructura i propietats físiques dels compostos orgànics.
3. Reaccions àcid-base dels compostos orgànics.
4. Estereoisomeria i anàlisi conformacional.
5. Reaccions orgàniques que afecten els compostos amb enllaços senzills.

4. METODOLOGIA

Les classes teòriques (4,5 crèdits teòrics; 1 crèdit = 10 h) seran de tipus magistral i, encara que fonamentalment les lliçons es desenvoluparan a la pissarra, en alguns temes s'utilitzaran transparències. Tanmateix, la discussió de qüestions serà promoguda pel professor i a instàncies de qualsevol alumne.



Les classes de seminaris (1,5 crèdits pràctics; 1 crèdit = 10 h), fonamentalment dirigides a la resolució de problemes, seran actives amb participació directa de l'alumnat. Aquestes classes són complementàries (aplicacions) i de suport als continguts de les classes teòriques.

S'aconsella que l'estudiant dediqui un mínim d'una hora d'estudi per hora de classe impartida pel professor i és important que consulti, com a mínim, un llibre de text general de química orgànica (vegeu l'apartat 6.1, «Bibliografia bàsica»).

5. AVALUACIÓ

L'avaluació dels crèdits teòrics i pràctics (seminaris i problemes) es durà a terme mitjançant un examen final al mes de gener. L'examen serà únic per a tots els grups de docència.

Constarà de preguntes curtes, preguntes de raonament i resolució de problemes. A criteri dels professors de l'assignatura, les preguntes poden estar formulades com a examen tipus test.

6. BIBLIOGRAFIA I ALTRES FONTS DOCUMENTALS

6.1 BIBLIOGRAFIA BÀSICA

VOLLHARDT, K. P. C.; SCHORE, N. E. *Química orgànica*. 3a ed. Barcelona: Omega, 2000. Material complementari a VOLLHARDT, K. P. C.; SCHORE, N. E. *Organic Chemistry Web Site* [en línia] <http://bcs.whfreeman.com/vollhardtschore5e/> (5a ed en anglès).

DEWICK, P. *Essentials of Organic Chemistry*, 1a ed., Wiley, 2006

WADE, JR., L. G. *Química orgànica*. 5a ed. Madrid: Pearson Prentice Hall, 2004.

CAREY, F. A. *Química orgànica*. 3a. ed. Madrid: McGraw-Hill, 1999.

SOLOMONS, T. W. G. *Química orgànica*. 2a ed. Mèxic: Limusa Wiley, 1999.

EGE, S. *Química orgànica. Estructura y reactividad*. 1r tom. Barcelona: Reverté, 1997.

QUINOÁ, E.; RIGUERA, R. *Cuestiones y ejercicios de química orgànica. Una guía de estudio y autoevaluación*. Madrid: McGraw-Hill, 1994.

CAREY, F. A.; ATKINS, R. C. *Study Guide and Solutions Manual to Accompany Organic Chemistry*. 3a ed. Nova York: McGraw Hill, 1996.

SCHORE, N. E. *Study Guide and Solutions Manual for Organic Chemistry*. Nova York: W. H. Freeman, 1987.
 ——. 2a ed. 1994.
 ——. 3a ed. 1999.

SOLOMONS, T. W. G. *Química orgánica. Guía de estudio y respuestas*. Mèxic: Limusa Wiley, 1999.

6.2 BIBLIOGRAFIA ESPECÍFICA

QUIÑOÀ, E.; RIGUERA, R. *Nomenclatura y representación de los compuestos orgánicos. Una guía de estudio y autoevaluación*. Madrid: McGraw-Hill, 1996.

SALES, J., VILARRASA, J. *Introducció a la Nomenclatura Química Inorgànica i Orgànica*, 5a ed. Editorial Reverté, 2003.

IUPAC. *Nomenclatura de química orgànica (Secciones A-H, Unión Internacional de Química Pura y Aplicada)*. Madrid: CSIC, RSEQ, 1987.

IUPAC. *Nomenclatura de química orgànica (Seccions A, B i C. Regles definitives de 1979)*. Barcelona: Institut d'Estudis Catalans, 1989.

PETERSON, W. R. *Formulación y nomenclatura, química orgànica*. 2a ed. Barcelona: Eunibar, 1977.

MAULEÓN, D.; DELGADO, A. *Manual de nomenclatura química sistemática de los fármacos (Aplicación de la normativa IUPAC y ejercicios resueltos)*. Barcelona: PPU, 1987.

7. COORDINACIÓ I PROFESSORAT

Coordinador: Antonio Delgado Cirilo

Professorat:

Grup	Professorat
M1 / M4	A. González, R. Griera, N. Mesquida
M2	• J. Bonjoch, E. Zulaica
M3	• A. Delgado, A. Gómez