

Mètodes Sintètics**2013/2014**

Codi: 102527

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OB	3	1

Professor de contacte

Nom: Rosa Maria Sebastián Pérez

Correu electrònic: RosaMaria.Sebastian@uab.cat

Utilització d'idiomes

Llengua vehicular majoritària: espanyol (spa)

Algun grup íntegre en anglès: No

Algun grup íntegre en català: No

Algun grup íntegre en espanyol: No

Prerequisits

Donat que el contingut d'aquesta assignatura és una continuació i ampliació de l'assignatura d'Estructura i Reactivitat dels Compostos Orgànics (ERCO), es recomana fortament que s'hagi aprovat aquesta assignatura de segon curs abans de matricular-se a Mètodes Sintètics.

Objectius

Una part important de la Química és la que es centra en l'estudi dels compostos de carboni, les seves propietats, la seva síntesi, la seva reactivitat i caracterització. En el Grau de Química de la UAB, els alumnes a segon curs, entren en contacte amb aquest tipus de química cursant l'assignatura d'Estructura i Reactivitat del Compostos Orgànics. Allà els alumnes es familiaritzen amb els diferents grups funcionals, i els diferents tipus de reaccions que poden donar lloc, a un nivell fonamental.

En l'assignatura de Mètodes Sintètics es pretén profunditzar en el tipus de reactivitat que presenten els compostos orgànics, no només coneixent les condicions de reacció que tenen lloc, si no també aprofundint en els mecanismes de reacció, i en alguns casos, utilitzant teories d'orbitals frontera per poder predir els resultats d'aquestes reaccions.

Els continguts d'aquesta assignatura es centraran principalment en diferents metodologies noves que permetin generar nous enllaços C-C, C=C, o C-heteroàtom. Els mecanismes de les diferents reaccions s'estudiaran i s'intentaran també agrupar per similituds. Altres transformacions com les reaccions de reducció i oxidació de compostos orgànics seran també tractades.

Els objectius concrets de l'assignatura es poden resumir en:

- 1.- Estudi de metodologies sintètiques per la formació d'enllaços C-C, C=C i C-Heteroàtom.
- 2.- Estudi de la transformació de grups funcionals.
- 3.- Estudi aprofundit dels mecanismes de les reaccions orgàniques.
- 4.- Dotar d'eines sintètiques als alumnes per tal que puguin ser capaços de preparar nous compostos orgànics a partir de precursors senzills i comercials.
- 5.- Introducció a la retrosíntesi de molècules orgàniques.

Competències

Química

- Adaptar-se a noves situacions.
- Aplicar els coneixements químics a la resolució de problemes de naturalesa quantitativa o qualitativa en àmbits familiars i professionals.
- Aprendre de manera autònoma.
- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
- Demostrar motivació per la qualitat.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, els principis, les teories i els fets fonamentals de les diferents àrees de la química.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
- Mantenir un compromís ètic.
- Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
- Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Tenir destresa per al càlcul numèric.
- Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
- Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Resultats d'aprenentatge

1. Adaptar-se a noves situacions.
2. Aprendre de manera autònoma.
3. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
4. Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
5. Demostrar motivació per la qualitat.
6. Descriure els diferents tipus d'isomeria en compostos orgànics.
7. Descriure els mecanismes de les principals reaccions orgàniques, així com els diversos factors que els afecten.
8. Descriure les metodologies sintètiques més rellevants per a la interconversió de grups funcionals i la formació d'enllaços carboni-carboni senzills i múltiples.
9. Determinar i representar la configuració dels centres quirals en compostos orgànics.
10. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
11. Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
12. Identificar els grups funcionals dels principals productes naturals orgànics i les seves reaccions més importants.
13. Identificar la reactivitat bàsica associada als diversos grups funcionals orgànics.
14. Identificar la relació d'isomeria entre diferents estructures de compostos orgànics.
15. Mantenir un compromís ètic.
16. Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
17. Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
18. Predir la reactivitat dels diversos grups funcionals orgànics davant de determinades condicions de reacció, així com l'estructura dels productes que s'hi obtindran.
19. Proposar idees i solucions creatives.
20. Proposar mecanismes de reacció en processos en què intervenen compostos orgànics.
21. Proposar vies sintètiques senzilles per a l'obtenció de determinats compostos orgànics a partir de certs reactius.
22. Raonar de forma crítica.
23. Resoldre problemes i prendre decisions.
24. Tenir destresa per al càlcul numèric.
25. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
26. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Continguts

Tema 1. Mètodes de determinació de mecanismes de reacció. Efecte de l'estructura molecular en la reactivitat

Conceptes generals sobre cinètica química. Principi de Curtin-Hammett. Efecte cinètic d'isòtop. Introducció de correlacions de Hammett. Marcatge isotòpic.

Tema 2. Formació d'enllaços C-C

Formació d'enolats. Regioselectivitat. Control cinètic i termodinàmic. Elements que afecten a aquest procés (tipus de base -contracció-, dissolvent). Reactivitat per C o O. Formació d'enolats de liti, èters d'enol de silici, enamines i azaenolats; aplicació en reaccions d'alquilació, addicions aldòliques dirigides i acilacions. Reacció de Knoevenagel. Alquilació d'aldehids utilitzant ditians. Reacció de Mannich. Addicions conjugades. Anelació de Robinson.

Tema 3. Formació d'enllaços C-C amb intervenció de reactius organometàl·lics

Conceptes generals sobre organolitiats i organomagnesians. Model de Felkin-Ahn. Organocuprats. Reacció de Reformatsky. Reacció de Heck.

Tema 4. Formació d'enllaços C=C

β -Eliminacions tèrmiques: piròlisi de xantats, eliminació de Hofmann i de Cope, eliminació de selenòxids. Reacció de Wittig: tipus d'ilurs, preparació, reactivitat i estereoquímica de la reacció. Reacció de Horner-Wardsworth-Emmons. Ilurs de sofre: tipus, preparació i reactivitat.

Tema 5. Formació d'enllaços C-C mitjançant reaccions concertades

Orbitals frontera. Regles de selecció de Woodward-Hoffman. Reaccions electrocícliques. Reacció de Diels-Alder: regio i estereoselectivitat. Transposicions sigmatròpiques [3,3] de Cope i de Claisen. Cicloadicions [2+2] tèrmiques i fotoquímiques.

Tema 6. Reaccions amb intermedis deficitaris en electrons d'elevada reactivitat

Intermedis catiónics: transposicions de Wagner-Meerwein. Carbens i carbenòids: preparació i reactivitat. Nitrens: preparació i reactivitat.

Tema 7. Reaccions de reducció

Hidrogenacions. Utilització d'hidrurs metàl·lics i de metalls alcalins.

Tema 8. Reaccions d'oxidació

Compendi dels mètodes ja estudiats per oxidació d'alcohols i carbonils (derivats de Mn, Cr, I i S). Oxidacions de grups carbonil i d'alquens utilitzant: peroxiàcids i peròxids. Epoxidació asimètrica de Sharpless. Rotura oxidativa d'alquens: HIO_4 , ozonòlisi.

Metodologia

Al llarg del curs l'alumne haurà de participar de diferents activitats formatives per tal d'assolir els coneixements i competències establerts. El seguiment i l'avaluació de l'assignatura es continuarà, per tant, es requereix la participació de tots els alumnes a totes les activitats. Concretament trobarem tres tipus d'activitats:

1.- Classes magistrals

Durant les classes magistrals el professor transmetrà fonamentalment els coneixements bàsics de la matèria; coneixements que s'hauran de completar amb el treball individual de l'alumne, consultant la bibliografia corresponent.

Les classes magistrals són un tipus d'activitat que exigeix poca interactivitat amb l'estudiant; estant

concebudes com un mètode fonamentalment unidireccional de transmissió de coneixements del professor cap a l'alumne. Durant les classes s'intentarà fer participar als estudiants fent qüestions que s'hauran de resoldre entre els alumnes utilitzant els coneixements previs d'aquests, així com els que s'aniran adquirint durant el curs.

Al llarg de les classes magistral s'aniran lliurant alguns exercicis que serviran per facilitar l'avaluació continuada dels alumnes. Segons l'evolució de les classes, el comentari i/o la resolució d'alguns d'aquests exercicis pot completar les classes magistrals agilitzant-les.

S'utilitzarà el Campus Virtual per transmetre als alumnes tot el material que el professor consideri necessari pel procés d'aprenentatge: programa de l'assignatura, problemes a resoldre, guions de problemes, transparències utilitzades durant el curs, etc....

2.- Classes de problemes

Al inici de curs s'entregarà als alumnes un dossier d'exercicis que els alumnes hauran d'anar resolent al llarg del curs. Durant les classes de problemes es discutiran les solucions proposades pels alumnes, a partir del seu treball autònom. Es farà especial èmfasi en la participació activa dels alumnes.

3.- Preparació d'exercicis a lliurar (treball individual o en grup)

Al llarg de l'assignatura el professor anirà distribuint a través del Campus Virtual de l'assignatura diferents exercicis que l'alumne haurà de preparar a casa i lliurar al professor a la data indicada. Una bona part d'aquests exercicis serviran per recordar els coneixements que els alumnes han adquirit a l'assignatura d'ERCO, amb l'objectiu que puguin entendre i assimilar més fàcilment els nous que se'ls hi van impartint a les classes magistrals. Alguns d'aquests exercicis poden servir també per reforçar també els nous coneixements, aplicant-los ells personalment.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de Teoria	45	1,8	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 25, 26
Classes de problemes	9	0,36	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26
Tipus: Autònomes			
Estudi, resolució de problemes	78	3,12	
Preparació d'exercicis per lliurar	4	0,16	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26

Avaluació

L'avaluació d'aquesta assignatura es farà de forma continuada, per tal de potenciar el treball continuat dels alumnes, afavorint així el seu aprenentatge. Aquesta metodologia dóna també informació al professor sobre l'assimilació dels continguts i la capacitat d'aplicar-los en la resolució de problemes per part dels alumnes. L'avaluació es farà principalment de forma individual.

Lliurament d'exercicis:

Al llarg del curs, a mida que el professor ho consideri oportú segons l'evolució de les classes teòriques, els

alumnes hauran de preparar individualment o en grup alguns exercicis que hauran de lliurar en els terminis prèviament establerts. Una part dels exercicis s'utilitzaran per a què els alumnes repassin els seus coneixements previs. Altra part, pot estar relacionada amb l'aplicació dels nous coneixements adquirits durant el curs. Aquest treball tindrà un pes en la nota global de l'avaluació continuada del 10 %.

Al llarg del curs es faran dos exàmens per tal d'avaluar els coneixements relacionats amb els continguts de les classes de teoria adquirits pels alumnes, així com la seva capacitat de resoldre problemes.

Primer examen parcial

Aquest avaluarà els continguts d'aproximadament un 40% del temari global de l'assignatura (pot variar en funció de l'evolució de les classes segons el grup). Aquest examen pot contenir tant preguntes teòriques com pràctiques (resolució de problemes) i tindrà un pes del 40 % de la nota global de l'avaluació continuada. A l'examen s'ha de treure més d'un 4 per tal de fer mitja amb les altres notes de l'avaluació. L'examen és obligatori.

Segon examen parcial/final

Una vegada acabades les classes teòriques, els alumnes s'examinaran del total de l'assignatura, tot i que la segona part del temari tindrà un pes proporcionalment superior. Aquest examen pot constar també de qüestions teòriques i pràctiques (resolució de problemes). La nota d'aquesta prova tindrà un pes del 50 % de la nota global de l'avaluació continuada, sempre que es superi l'examen amb una nota superior a 4. L'examen és obligatori.

Per aprovar l'assignatura en primera instància, s'ha de treure un 5 sobre 10 després de fer la mitja amb totes les notes resultants de l'avaluació continuada. (2 exàmens i lliurament d'exercicis).

Examen de recuperació

Si els alumnes no superen l'assignatura mitjançant el mètode de l'avaluació continuada, tindran l'opció de presentar-se a un examen de recuperació, el qual englobarà tots els continguts impartits durant el curs, i on s'hauran de resoldre també qüestions pràctiques. La nota de l'examen ha de ser superior a 4, sobre 10, i la nota final de l'assignatura, en aquest cas, serà la mitjana ponderada entre la nota d'aquest examen, amb un pes del 90 %, i la nota de l'avaluació continuada (10 %)

Es considerarà com alumne no presentat a aquell que no faci el primer parcial de l'assignatura. Aquest alumne no tindrà dret a fer ni el segon examen parcial ni l'examen de recuperació.

Tots aquells alumnes que hagin fet el primer l'examen parcial es consideraran com presentats encara que decideixin no fer cap prova d'avaluació més.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Exàmens parcials i recuperació	90 %	10	0,4	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26
Lliurament d'exercicis	10 %	4	0,16	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 25, 26

Bibliografia

Organic Chemistry de J. Clayden, Nick Greeves, S. Warren i P. Wothers. Oxford U. P. Oxford New York, 2005.

Organic Chemistry (10th Ed) de T.W. G. Solomons i C. B. Fryhle. John Wiley & Sons, Inc. New York, 2010.

Organic Chemistry: Structure and function (5th Edition) de K.P.C. Vollhardt i N.E.Schore, W.H. Freeman and Company New York, 2007.

Modern Methods of Organic Synthesis (4th Ed) de W. Carruthers i I. Coldham. Cambridge University Press , Cambridge (UK), 2004.

Advanced Organic Chemistry (5th Edition) de M.B. Smith and J. March . John Wiley & Sons, INc. New York, 2001.