

Métodos Sintéticos

Código: 102527
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2502444 Química	OB	3	1

Contacto

Nombre: Marta Figueredo Galimany
Correo electrónico: Marta.Figueredo@uab.cat

Uso de idiomas

Lengua vehicular mayoritaria: catalán (cat)
Algún grupo íntegramente en inglés: No
Algún grupo íntegramente en catalán: Sí
Algún grupo íntegramente en español: No

Equipo docente

Roser Pleixats Rovira
Joan Pau Bayón Rueda

Prerequisitos

Dado que el contenido de esta asignatura es una continuación y extensión de la materia de Estructura y Reactividad de los Compuestos Orgánicos (ERCO), recomendamos encarecidamente que se haya aprobado esta asignatura de segundo curso antes de matricularse de Métodos Sintéticos.

Objetivos y contextualización

Profundizar en el estudio de la reactividad de los compuestos orgánicos, considerando los siguientes aspectos:

1. Estudio de nuevos métodos para la formación de enlaces carbono-carbono y carbono-heteroátomo y para la interconversión entre grupos funcionales.
2. Estudio de los mecanismos de reacción: herramientas cinéticas y no cinéticas y modelos teóricos.
3. Estudio de la influencia de las condiciones de reacción en la selectividad y el rendimiento.
4. Dotar de herramientas sintéticas a los alumnos a fin de que puedan ser capaces de diseñar la síntesis de nuevos compuestos orgánicos a partir de precursores sencillos y comerciales.

Competencias

- Adaptarse a nuevas situaciones
- Aplicar los conocimientos químicos a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa o cualitativa en ámbitos familiares y profesionales
- Aprender de forma autónoma
- Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa
- Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor
- Demostrar motivación por la calidad

- Demostrar que comprende los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales de las diferentes áreas de la Química
- Gestionar la organización y planificación de tareas
- Gestionar, analizar y sintetizar información
- Mantener un compromiso ético
- Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales
- Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos
- Poseer destreza para el cálculo numérico.
- Proponer ideas y soluciones creativas
- Razonar de forma crítica
- Resolver problemas y tomar decisiones
- Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo
- Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información

Resultados de aprendizaje

1. Adaptarse a nuevas situaciones
2. Aprender de forma autónoma
3. Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa
4. Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor
5. Demostrar motivación por la calidad
6. Describir las metodologías sintéticas más relevantes para la interconversión de grupos funcionales y la formación de enlaces carbono-carbono sencillos y múltiples
7. Describir los diferentes tipos de isomería en compuestos orgánicos
8. Describir los mecanismos de las principales reacciones orgánicas, así como los diversos factores que los afectan
9. Determinar y representar la configuración de los centros quirales en compuestos orgánicos
10. Gestionar la organización y planificación de tareas
11. Gestionar, analizar y sintetizar información
12. Identificar la reactividad básica asociada a los diversos grupos funcionales orgánicos
13. Identificar la relación de isomería entre diferentes estructuras de compuestos orgánicos
14. Identificar los grupos funcionales de los principales productos naturales orgánicos y sus reacciones más importantes
15. Mantener un compromiso ético
16. Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales
17. Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos
18. Poseer destreza para el cálculo numérico
19. Predecir la reactividad de los diversos grupos funcionales orgánicos ante determinadas condiciones de reacción, así como la estructura de los productos que se obtendrán
20. Proponer ideas y soluciones creativas
21. Proponer mecanismos de reacción en procesos en los que intervienen compuestos orgánicos
22. Proponer vías sintéticas sencillas para la obtención de determinados compuestos orgánicos a partir de ciertos reactivos
23. Razonar de forma crítica
24. Resolver problemas y tomar decisiones
25. Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo
26. Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información

Contenido

Tema 1. Formación de enlaces C-C a partir de compuestos con un grupo metileno activado: Formación de enolatos. Regioselectividad. Control cinético y termodinámico. Elementos que afectan a este proceso (tipo de base -contracción-, disolvente). Reactividad por C u O. Formación de enolatos de litio, éteres de enol de silicio, enaminas y azaenolatos; aplicación en reacciones de alquilación. Adiciones aldólicas dirigidas y acilaciones. Reacción de Knoevenagel. Alquilación de aldehídos utilizando ditianos. Reacción de Mannich. Adiciones conjugadas. Anelación de Robinson.

Tema 2. Formación de enlaces C-C con intervención de reactivos organometálicos: Conceptos generales sobre organolitios y organomagnesianos. Modelo de Felkin-Ahn. Organocupratos. Reacción de Reformatsky. Reacción de Heck.

Tema 3. Formación de enlaces C=C: β -Eliminaciones térmicas: pirólisis de xantatos, eliminación de Hofmann y de Cope, eliminación de selenóxidos. Reacción de Wittig: tipos de iluros, preparación, reactividad y estereoselectividad de la reacción. Reacción de Horner-Wardsworth-Emmons. Iluros de azufre: tipos, preparación y reactividad. Reacción de metátesis de alquenos.

Tema 4. Formación de enlaces C-C mediante reacciones concertadas: Orbitales frontera. Reglas de selección de Woodward-Hoffman. Reacciones electrocíclicas. Cicloadiciones [2+2] térmicas y fotoquímicas. Reacción de Diels-Alder: regio- y estereoselectividad. Transposiciones sigmatrópicas [3,3] de Cope y de Claisen.

Tema 5. Reacciones con intermedios deficitarios en electrones de elevada reactividad: Intermedios radicalarios: adición de tioles a alquenos, ciclaciones, formación de pinacoles. Intermedios catiónicos: transposiciones de Wagner-Meerwein, ciclaciones, transposición pinacolínica. Carbenos: preparación y reactividad, ciclopropanación, reacción de Simmons-Smith, transposición de Wolff, homologación d'Arndt-Eistert. Nitrenos: preparación y reactividad, transposiciones de Curtius, Schmidt, Hofmann y Beckmann.

Tema 6. Reacciones de reducción: Hidrogenación: catálisis heterogénea y homogénea. Hidrogenolisis. Utilización de hidruros de boro y aluminio: selectividad. Aminación reductiva. Reducción de Meerwein-Ponndorf-Verley. Reducción con hidruro de tributilestano. Reducción con metales alcalinos en disolución: reacciones de Birch y Bouveault-Blanc, condensación aciloínica, deshalogenación. Desoxigenación: reacciones de Clemmensen y Wolff-Kishner. Desulfuración de ditianos.

Tema 7. Reacciones de oxidación: Oxidación de alcoholes: reactivos de Cr(VI), MnO_2 , oxidación de Swern, oxidación de Dess- Martin. Oxidación de alquenos: $KMnO_4$, OsO_4 , peróxidos y perácidos, epoxidación asimétrica de Sharpless, rotura oxidativa. Oxidación de aldehídos y cetonas: a ácidos carboxílicos, alfa-carbonílica, reacción de Baeyer-Villiger, reacción del haloformo. Oxidación alílica.

Tema 8. Métodos de determinación de mecanismos de reacción. Efecto de la estructura molecular en la reactividad: Datos cinéticos y termodinámicos. Principio de Curtin-Hammett. Efecto cinético de isótopo. Introducción de correlaciones de Hammett. Métodos no cinéticos: identificación de productos; marcaje isotópico; experimentos de cruzamiento; datos estereoquímicos; detección/atrapado de intermedios.

Tema 9. Síntesis orgánica: Introducción al análisis retrosintético. Concepto de sintón. Síntesis lineal y síntesis convergente. Quimio-, regio- y estereoselectividad. Protección de grupos funcionales.

Metodología

Se utilizará el Campus Virtual para proporcionar a los alumnos todo el material que el profesor considere necesario para el proceso de aprendizaje: programa de la asignatura, problemas para resolver, copia de las presentaciones, etc.

A lo largo del curso el alumno deberá participar en diferentes actividades formativas a fin de adquirir los conocimientos y competencias establecidos. Se realizarán tres tipos de actividades:

1.- Clases magistrales

Durante las clases magistrales el profesor transmitirá fundamentalmente los conocimientos básicos de la materia, que deberán trabajarse individualmente consultando la bibliografía correspondiente. Durante las clases se intentará la participación de los estudiantes, mediante la propuesta de cuestiones que deberán resolver.

2.- Clases de problemas

Durante el curso se proporcionará a los alumnos hojas de ejercicios que deberán resolver. En las clases de problemas se discutirán las soluciones propuestas por los alumnos, a partir de su trabajo autónomo. Se hará especial énfasis en la participación activa de los alumnos.

3.- Preparación de ejercicios para entregar (trabajo individual)

A lo largo del curso los profesores distribuirán diferentes ejercicios que el alumno deberá resolver y entregar en la fecha indicada.

3.- Seminarios

Se dispondrá de dos horas presenciales previas a los exámenes para repasar conceptos y/o clarificar dudas.

Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases de problemas	12	0,48	1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 6, 9, 10, 11, 14, 12, 13, 15, 16, 17, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 18, 25, 26
Clases de teoría	38	1,52	1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 6, 9, 10, 11, 14, 12, 13, 15, 16, 17, 19, 20, 21, 22, 23, 25, 26
Seminarios	2	0,08	
Tipo: Autónomas			
Estudio, resolución de problemas	80	3,2	
Preparación de ejercicios para entregar	4	0,16	1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 6, 9, 10, 11, 14, 12, 13, 15, 16, 17, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 18, 25, 26

Evaluación

La evaluación de esta asignatura se hará de forma continuada, a fin de potenciar el trabajo sostenido de los alumnos, favoreciendo su aprendizaje. Esta metodología suministrará también información al profesor sobre la asimilación de los contenidos y la capacidad de aplicarlos a la resolución de problemas por parte de los alumnos. La evaluación se hará de forma individual.

Entrega de ejercicios:

A lo largo del curso, según el profesor lo considere oportuno, los alumnos deberán preparar algunos ejercicios que deberán entregar en los plazos previamente establecidos. El contenido de los ejercicios puede incluir materia de las asignaturas de Química Orgánica de cursos precedentes. También se podrán realizar pequeñas pruebas en clase. Este trabajo tendrá un peso en la nota global de la evaluación continuada del 10%.

A lo largo del curso se realizarán dos exámenes parciales a fin de evaluar los conocimientos relacionados con los contenidos de las clases de teoría adquiridos por los alumnos, así como su capacidad para resolver problemas.

Primer examen parcial

Este examen evaluará los contenidos de aproximadamente un 50% del temario global de la asignatura. Este examen podrá plantear tanto preguntas teóricas como prácticas (resolución de problemas) y tendrá un peso del 45% de la calificación global de la evaluación continuada. En el examen deberá obtenerse un mínimo de 5 puntos sobre 10 para poder promediar con las otras calificaciones de la evaluación.

Segundo examen parcial

Este examen evaluará los contenidos de aproximadamente un 50% del temario global de la asignatura. Este examen podrá plantear tanto preguntas teóricas como prácticas (resolución de problemas) y tendrá un peso del 45% de la calificación global de la evaluación continuada. En el examen deberá obtenerse un mínimo de 5 puntos sobre 10 para poder promediar con las otras calificaciones de la evaluación.

Para aprobar la asignatura en primera instancia, deberán obtenerse 5 puntos sobre 10 después de promediar todas las calificaciones resultantes de la evaluación continuada (2 exámenes y entrega de ejercicios).

Examen de recuperación

Los alumnos que no superen la asignatura mediante el método de evaluación continuada, tendrán la opción de presentarse a un examen de recuperación, el cual constará de dos partes, correspondientes a la materia del primer examen parcial y el segundo examen parcial, respectivamente.* Para aprobar, la calificación de cada una de las dos partes del examen de recuperación deberá ser superior a 5 puntos sobre 10 y la calificación final de la asignatura, en este caso, será el promedio ponderado entre la nota de este examen, con un peso del 45% para cada una de las partes, y la nota de los ejercicios entregados, con un peso del 10%.

* Los alumnos que no aprueben por curso, pero hayan obtenido una nota mínima de 6 puntos sobre 10 en alguno de los exámenes parciales quedarán exentos de realizar la recuperación de la parte correspondiente y se les mantendrá esta nota a efectos de promediar con las otras notas de la evaluación.

Para participar en la recuperación el alumnado debe haber sido previamente evaluado en un conjunto de actividades el peso de las cuales equivalga a un mínimo de dos terceras partes de la calificación total de la asignatura. Por lo tanto, será imprescindible realizar los dos exámenes parciales para tener derecho a la recuperación de cualquiera de los mismos.

Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Entrega de ejercicios	10%	4	0,16	1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 6, 9, 10, 11, 14, 12, 13, 15, 16, 17, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26
Exámenes parciales y de recuperación	90%	10	0,4	1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 6, 9, 10, 11, 14, 12, 13, 15, 16, 17, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 18, 25, 26

Bibliografía

Libros de texto:

Organic Chemistry (2nd Ed) de J. Clayden, Nick Greeves, S. Warren y P. Wothers. Oxford U. P. Oxford New York, 2012.

Organic Chemistry (11th Ed) de T.W. G. Solomons y C. B. Fryhle. John Wiley & Sons, Inc. New York, 2013.

Organic Chemistry: Structure and function (6th Edition) de K.P.C. Vollhardt y N.E.Schore, W.H. Freeman and Company New York, 2010.

Advanced Organic Chemistry (6th Edition) de M.B. Smith and J. March. John Wiley & Sons, INC. New York, 2013.

Enlaces web:

Diccionario de Terminología Química: <http://goldbook.iupac.org/>

Nomenclatura y Estructuras: <http://www.freechemsketch.com/>

ChemDraw: <http://sitelicense.cambridgesoft.com/sitelicense.cfm?sid=1111>

Dirección: xxx@campus.uab.es

Organic Chemistry Portal: www.organic-chemistry.org