

Métodos Sintéticos

Código: 102527
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2502444 Química	OB	3	1

La metodología docente y la evaluación propuestas en la guía pueden experimentar alguna modificación en función de las restricciones a la presencialidad que impongan las autoridades sanitarias.

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

Otras observaciones sobre los idiomas

La bibliografía recomendada y el material docente puede ser en inglés

Equipo docente

Roser Pleixats Rovira

Joan Pau Bayón Rueda

Adelina Vallribera Massó

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 metíleno activado: Formación de enolatos. Regioselectividad. Control cinético y termodinámico. Elementos que afectan a este proceso (tipo de base -contracatión-, 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 organolitiados y organomagnesianos. Modelo de Felkin-Ahn. Organocupratos. Reacción de Reformatsky. Reacciones promovidas por paladio.

Tema 3. Formación de enlaces C=C: β -Eliminaciones térmicas: pirolisis 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-Ponndorff-Verley. Reducción con hidruro de tributilestaño. 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 cuatro tipos de actividades:

1.- Clases presenciales de teoría

Durante una parte de las clases presenciales el profesor destacará los aspectos teóricos básicos de la materia de los diferentes temas, que los alumnos deberán trabajar individualmente consultando el material accesible a

través del campus virtual y la bibliografía correspondiente. También se dedicará tiempo a resolver dudas de los estudiantes y a la discusión de los aspectos más relevantes de cada tema.

2.- Clases presenciales de problemas

Durante el curso se proporcionará a los alumnos hojas de ejercicios que deberán resolver. En las clases de problemas presenciales 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.- Sesiones no presenciales

Durante el curso se dedicarán una serie de sesiones no presenciales a orientar el trabajo autónomo de los estudiantes a partir del material entregado a través del campus virtual.

4.- Resolución de ejercicios para entregar (trabajo individual)

A lo largo del curso los profesores plantearán diferentes ejercicios que el alumno deberá resolver individualmente en sesiones presenciales o bien entregar telemáticamente en la fecha indicada.

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			
Clases de teoría	37	1,48	1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 6, 9, 10, 11, 14, 12, 13, 15, 16, 17, 19, 20, 21, 22, 23, 25, 26
Tipo: Autónomas			
Estudio, resolución de problemas	82	3,28	
Preparación de ejercicios para entregar	5	0,2	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, cuando el profesor lo considere oportuno, los alumnos deberán resolver algunos ejercicios en el horario de clase presencial o entregarlos en los plazos previamente establecidos. El contenido de los ejercicios puede incluir materia de las asignaturas de Química Orgánica de cursos precedentes. Este trabajo tendrá un peso en la nota global de la evaluación continuada del 20%.

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 40% 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 40% 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 40% para cada una de las partes, y la nota de los ejercicios entregados, con un peso del 20%.

* 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	20%	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	80%	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 i P. Wothers. Oxford U. P. Oxford New York, 2012. ISBN: 978-0-19-927029-3.

Advanced Organic Chemistry: Part B: Reaction and Synthesis, Francis A. Carey and Richard J. Sundberg. Fifth Edition, Springer. e-ISBN-13: 978-0-387-44899-2.

March's Advanced Organic Chemistry, M. B. Smith. Wiley. ISBN: 978-1-119-37178-6.

Enlaces web:

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

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

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

Dirección: xxx@campus.uab.es

Organic Chemistry Portal: www.organic-chemistry.org