



Máster en Investigación Química 60620 - Química Orgánica avanzada

Guía docente para el curso 2015 - 2016

Curso: , Semestre: , Créditos: 6.0

Información básica

Profesores

No están disponibles estos datos.

Recomendaciones para cursar esta asignatura

Se recomienda tener conocimientos amplios de Química Orgánica y Química Organometálica y saber realizar búsquedas bibliográficas a través de las principales herramientas accesibles en la Facultad (SciFinder, ACS, ScienceDirect, etc.).

Actividades y fechas clave de la asignatura

El horario de clases y el calendario de exámenes se publicarán en la web de la Facultad de Ciencias (<http://ciencias.unizar.es>). Todo lo relativo a actividades relacionadas con la evaluación continua (elección y entrega de trabajos) se publicará a través del anillo digital docente. Las pruebas relacionadas con la evaluación continua se publicarán también en el tablón del Departamento de Química Orgánica.

Inicio

Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados...

- 1:** Identificar los productos que se obtendrán tras la aplicación de una determinada secuencia sintética de varias etapas, prestando especial atención a la estereoquímica de los productos resultantes y razonar la formación de subproductos indeseables.
- 2:** Evaluar y diseñar procedimientos sintéticos razonables que permitan preparar selectivamente un determinado compuesto a partir de productos de partida comerciales o que se puedan obtener con facilidad, haciendo uso de grupos protectores, si es necesario.
- 3:** Seleccionar mecanismos de reacción previamente conocidos que permitan explicar el resultado de una reacción, evaluando críticamente en algunos casos la información proporcionada por una o varias técnicas de determinación de mecanismos de reacción.

- 4:** Dilucidar la estructura química de un compuesto orgánico a partir de sus datos espectroscópicos obtenidos a través de diversas técnicas instrumentales.
- 5:** Analizar y sintetizar la información obtenida tras una búsqueda bibliográfica en una base de datos u otras fuentes de información del ámbito de la química orgánica.

Introducción

Breve presentación de la asignatura

Tomando como punto de partida la formación en Química Orgánica que se adquiere en el grado en Química, la asignatura “Química Orgánica Avanzada” está diseñada para profundizar en una serie de conceptos avanzados que no se han visto en el Grado o se han tratado de forma general. Dichos conceptos incluyen todos los procesos pericíclicos (cicloadiciones y transposiciones), distinción de procesos concertados y por pasos, estrategias generales de síntesis orgánica (teniendo en cuenta la elección de grupos protectores), reacciones promovidas o catalizadas por metales de transición, así como el estudio en detalle (incluyendo aproximaciones computacionales) de mecanismos de reacción y el aprendizaje de técnicas avanzadas, principalmente bidimensionales, de resonancia magnética nuclear.

Contexto y competencias

Sentido, contexto, relevancia y objetivos generales de la asignatura

La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:

- Profundizar en el conocimiento de reacciones promovidas por metales de transición.
- Formar al alumno en estrategias sintéticas de interés para el diseño y preparación de compuestos orgánicos.
- Diseñar mecanismos de reacción de procesos orgánicos de varios pasos.
- Diferenciar los diversos grupos protectores que se pueden emplear en una secuencia sintética.
- Conocer las diferentes técnicas avanzadas de resonancia magnética nuclear que pueden emplearse en la elucidación estructural de compuestos orgánicos.

Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

La asignatura profundiza en los conceptos más avanzados de la Química Orgánica. Sus contenidos completan los adquiridos en las asignaturas Química Orgánica I y Química Orgánica II (y las optativas Ampliación de Química Orgánica y Química Organometálica) del Grado en Química.

Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...

- 1:** Comprender las bases de la reactividad de los compuestos orgánicos que permitan predecir el resultado de una reacción y la selección de los reactivos y las condiciones de reacción más adecuadas para llevarla a la práctica.
- 2:** Comprender las bases del análisis retro sintético y su aplicación a la resolución de problemas en síntesis orgánica.
- 3:** Comprender los métodos de síntesis orgánica modernos, prestando especial atención en aquellos más eficientes y selectivos.
- 4:** Seleccionar técnicas para la determinación de mecanismos de reacción y proponer mecanismos de reacciones orgánicas que sean coherentes con los datos experimentales.

- 5:** Comprender los principios básicos de las técnicas avanzadas más utilizadas para la caracterización de compuestos orgánicos y manejar de forma integrada la información contenida en los distintos espectros para resolver la estructura de compuestos orgánicos desconocidos.

Importancia de los resultados de aprendizaje que se obtienen en la asignatura:

Los resultados de aprendizaje de la asignatura son fundamentales para adquirir una alta especialización en Química Orgánica que permita abordar problemas complejos directamente relacionados con el diseño de rutas sintéticas de productos de una cierta complejidad, la elucidación estructural y de mecanismos de reacción.

Evaluación

Actividades de evaluación

El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación

1:
EVALUACIÓN CONTINUA

La evaluación de los conocimientos se realizará valorando de forma continua cada una de las partes de que consta el curso.

- Seguimiento y participación activa en las clases, resolución de cuestiones teórico-prácticas y presentación de resúmenes de charlas que pudieran programarse (10%)
- Realización de trabajos y búsquedas bibliográficas (30%)
- Prueba escrita (60%)

Para presentarse a la prueba escrita se habrán tenido que realizar todas las actividades propuestas. La calificación final será la media ponderada de las actividades realizadas a lo largo del curso.

2:
Los alumnos que no hayan superado todas las pruebas parciales, que no opten por la evaluación continua o que deseen mejorar su calificación deberán realizar una prueba global que supondrá el 100 % de la calificación. En este último caso, el alumno mantendrá la mejor de las dos calificaciones obtenidas (evaluación continua o prueba global).

3:
El número de convocatorias oficiales de examen a las que la matrícula da derecho, así como el sistema de evaluación y calificación se ajustarán a la normativa vigente en la Universidad de Zaragoza.

http://wzar.unizar.es/servicios/maste/docum/rto_%20permanencia14.pdf

<http://wzar.unizar.es/servicios/coord/norma/evalu/evalu.html>

Actividades y recursos

Presentación metodológica general

El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:

La metodología de la asignatura se basa en:

1. Clases teóricas magistrales (4 ECTS)
2. Clases de problemas (1 ECTS)
3. Realización de trabajos tutelados (incluyendo búsquedas bibliográficas) (1 ECTS)
4. Asistencia a conferencias en la Facultad de Ciencias (actividad complementaria como estudio)

Todas las actividades se indicarán a través del anillo digital docente (<http://add.unizar.es>)

Actividades de aprendizaje programadas (Se incluye programa)

El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades...

1:

Clases magistrales y resolución de problemas y casos prácticos con el siguiente programa:

1. Reacciones pericíclicas y transposiciones. Cicloadiciones concertadas y por pasos.
2. Síntesis orgánica mediada por metales de transición. Acoplamientos C-C catalizados por Pd (Heck, Stille, Suzuki, Negishi, Sonogashira, Buchwald-Hartwig, etc.). Acoplamientos con boro, silicio, estaño, zinc y magnesio. Sustitución nucleófila alílica (Tsuji-Trost). Metatesis. Acoplamientos C-heteroátomo.
3. Investigación de mecanismos de reacción en Química Orgánica. Principio de Curtin-Hammett. Postulado de Hammond. Control cinético/termodinámico. Técnicas computacionales (ab initio, DFT, basis sets)
4. Organocatálisis. Principios básicos. Tipos: Covalente y no covalente. Aminas. Ácidos y bases de Lewis. Catálisis por transferencia de fase. Activación mediante puentes de hidrógeno
5. Análisis retrosintético. Formación de enlaces C-C. Transformación de grupos funcionales (FGI). Síntesis de anillos. Grupos protectores en Síntesis Orgánica
6. Técnicas avanzadas en Resonancia Magnética Nuclear
7. Nuevas tendencias en Química Orgánica.

Todas las clases magistrales irán seguidas de las correspondientes clases de problemas

Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

Las sesiones presenciales (clases de teoría y problemas) tendrán lugar en el aula y en el horario indicado por la secretaría de la Facultad de Ciencias y se podrá consultar al inicio del curso en la web: <http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>

A partir de la primera semana de inicio del curso se pondrá a disposición de los alumnos, en el anillo digital docente, un listado de trabajos para que se elijan. La entrega de los mismos se hará por correo electrónico en cualquier de los formatos PDF, PPT(X) ó DOC(X) no siendo necesario presentarlo impreso. La fecha de presentación deberá ser, como mínimo, 15 días antes de la prueba final correspondiente a la evaluación continua.

La fecha, lugar y hora de esta prueba se anunciará con suficiente antelación en el tablón del Departamento de Química Orgánica y en el anillo digital docente.

La prueba final (global) de la asignatura se desarrollará en el lugar, fecha y hora indicados por la Facultad de Ciencias y se podrá consultar al inicio del curso en la web: <http://ciencias.unizar.es>

Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

1. Organic Synthesis. The disconnection approach (2nd edition). S. Warren, P. Wyatt. Ed. John Wiley & sons. 2008
2. Reaction mechanisms in organic synthesis. R. K. Parashar. Ed. Blackwell. 2009
3. Protecting groups (3rd edition). P. J. Kocienski. Ed. Thieme. 2005

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

1. Organic Synthesis. M. B. Smith. Ed. MacGraw Hill.
2. Organic syntheses based on name reactions and unnamed reactions. A. Hassner, C. Stummer. Ed. Pergamon. 1994
3. Organic synthesis with carbohydrates. G.-J. Boons, K. J. Hale. Ed. Sheffield Academic Press. 2000
4. Chemical Synthesis of nucleoside analogues. P. Merino. Ed. John Wiley & sons. 2013
5. Protective groups in organic synthesis (4th edition). P. G. M. Wuts, T. W. Greene. Ed. John Wiley & sons. 2006
6. Catalytic asymmetric synthesis (3rd edition). I. Ojima. Ed. John Wiley & sons. 2010
7. Catalytic methods in asymmetric synthesis. M. Gruttadauria, F. Giacalone. John Wiley & sons. 2011
8. Advanced Organic Chemistry (4th edition). F. A. Carey and R. J. Sundberg. Ed. Springer. 2000
9. Introduction to the strategies for Organic Synthesis. L. S. Starkey. Ed. John Wiley & sons. 2012

SITIOS WEB

1. Organic Synthesis. <http://www.orgsyn.org/>

Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada