

Máster Universitario en Investigación Química y Química Industrial

Módulo de Formación Obligatoria
Avanzada

PROFUNDIZACIÓN EN QUÍMICA ORGÁNICA

Guía Docente

Guía Docente

1. Datos descriptivos de la materia.

Carácter: Obligatoria

Convocatoria: 1^{er} cuatrimestre

Créditos: 3 ECTS

Profesorado:

José Pérez Sestelo

Profesor Titular del Departamento de Química Fundamental
Facultad de Ciencias, Universidad de A Coruña
sestelo@udc.es

Luis Sarandeses da Costa

Catedrático del Departamento de Química Fundamental
Facultad de Ciencias, Universidad de A Coruña
luis.sarandeses@udc.es

Susana López Estévez

Profesora Titular del Departamento de Química Orgánica
Facultad de Química, Universidad de Santiago de Compostela
susana.lopez.estevez@usc.es

Emilio Quiñoá Cabana

Catedrático del Departamento de Química Orgánica
Facultad de Química, Universidad de Santiago de Compostela
emilio.quinoa@usc.es

María Beatriz Iglesias Antelo

Profesora Titular del Departamento de Química Orgánica
Facultad de Química, Universidad de Vigo
bantelo@uvigo.es

Emilia Tojo Suárez

Profesora Titular del Departamento de Química Orgánica

Facultad de Química, Universidad de Vigo

etojo@uvigo.es

Idioma en que es impartida: Castellano e inglés

2. Situación, significado e importancia de la materia en el ámbito de la titulación.

2.1. Módulo al que pertenece la materia en el Plan de Estudios. Materias con las que se relaciona.

Módulo de Formación Obligatoria Avanzada. Se relaciona fundamentalmente con las asignaturas de dicho módulo y estas asignaturas son básicas para el Bloque de Formación Especializada y para el Módulo de Iniciación a la Investigación y a la Práctica Profesional.

2.2. Papel que juega este curso en ese bloque formativo y en el conjunto del Plan de Estudios.

Esta asignatura es clave en el módulo de Formación Obligatoria Avanzada, porque completa el conocimiento de los principales mecanismos de las reacciones orgánicas, los métodos para su determinación y se profundiza en la metodología sintética utilizada en la preparación de compuestos orgánicos. Resulta imprescindible para abordar las materias de las diferentes especialidades.

2.3. Conocimientos previos (recomendados/obligatorios) que los estudiantes han de poseer para cursar la asignatura.

Es necesario poseer los conocimientos asociados a las materias de Química Orgánica en los diferentes grados de las universidades implicadas.

3. Objetivos del aprendizaje y competencias a alcanzar por el estudiante con la asignatura.

3.1. Objetivos del aprendizaje.

- Conocer de forma completa e integrada los principales mecanismos de las reacciones orgánicas.
- Conocer los principales métodos empleados en la determinación del mecanismo de una reacción en Química orgánica.
- Profundizar en la metodología sintética utilizada en la preparación de compuestos orgánicos.

3.2. Competencias básicas y generales.

- CB6. Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
- CB7. Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio
- CB9. Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
- CB10. Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

- CG2. Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación
- CG5. Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química
- CG7. Ser capaz de trabajar en equipo y adaptarse a equipos multidisciplinares

3.3. Competencias específicas.

- CE1. Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química
- CE2. Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas
- CE4. Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química

4. Contenidos del curso.

4.1. Epígrafes del curso:

Tema 1. Mecanismos de las reacciones orgánicas.

Tema 2. Reacciones pericíclicas.

Tema 3. Radicales y carbenos.

Tema 4. Reacciones fotoquímicas.

Tema 5. Métodos sintéticos y aplicaciones.

4.2. Bibliografía recomendada

4.2.1. Básica (manual de referencia).

- Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S. *Organic Chemistry*; 2nd Ed.; Oxford University Press: Oxford (UK), 2012.

4.2.2. Complementaria.

- Carey, F. A.; Sundberg, R. J. *Advanced Organic Chemistry*; 5th Ed.; Springer: New York, 2007.
- Smith, M. B.; March, J. *March's Advanced Organic Chemistry*; 7th Ed.; Wiley: Chichester (UK), 2013.

TEMA 1. Mecanismos de las reacciones orgánicas.

1. Sentido del tema (Introducción)

En este tema se estudiarán los conceptos fundamentales acerca de los mecanismos de las reacciones orgánicas y de los estados de transición de las mismas. Se analizará el efecto de la estructura y de los sustituyentes en la cinética y el mecanismo de las reacciones (ecuación de Hammett) y el efecto de los disolventes. Asimismo, se abordarán los principales métodos de determinación de los mecanismos y de caracterización de los intermedios de las reacciones.

2. Epígrafes del tema.

Introducción: mecanismos de reacción, estado de transición, energía de activación. Control cinético y Control termodinámico. Efecto del disolvente. Postulado de Hammond, principio de Curtin-Hammett. Determinación de mecanismos de reacción. Efecto de los sustituyentes: ecuación de Hammett. Efectos isotópicos. Catálisis ácida y básica. Caracterización de intermedios.

3. Bibliografía

- Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S. *Organic Chemistry*; 2nd Ed.; Oxford University Press: Oxford (UK), 2012; Capítulo 39.
- Carey, F. A.; Sundberg, R. J. *Advanced Organic Chemistry*; 5th Ed.; Springer: New York, 2007; Volumen A, Capítulo 3.

4. Actividades a desarrollar.

Resolver los ejercicios indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada (el alumno debe guardar una copia del trabajo entregado). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

TEMA 2. Reacciones pericíclicas.

1. Sentido del tema (Introducción)

En este tema se analizarán las principales reacciones concertadas que transcurren a través de estados de transición cíclicos (reacciones pericíclicas). Se comenzará con una descripción de los principios generales de la teoría del orbital frontera y con una racionalización de las reacciones mediante las reglas de Woodward y Hoffmann, para continuar con las reacciones de cicloadición (destacando la reacción de Diels-Alder), transposiciones sigmatrópicas y reacciones electrocíclicas.

2. Epígrafes del tema.

Teoría del orbital frontera. Reglas de Woodward y Hoffmann. Cicloadiciones: Diels-Alder, [2+2], [3+2]. Transposiciones sigmatrópicas: Claisen, Cope, [2,3], [1,n], énicas, quelotrópicas. Reacciones electrocíclicas.

3. Bibliografía

- Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S. *Organic Chemistry*; 2nd Ed.; Oxford University Press: Oxford (UK), 2012; Capítulos 34 y 35.
- Carey, F. A.; Sundberg, R. J. *Advanced Organic Chemistry*; 5th Ed.; Springer: New York, 2007; Volumen A, Capítulo 10 y Volumen B, Capítulo 6.

4. Actividades a desarrollar.

Resolver los ejercicios indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada (el alumno debe guardar una copia del trabajo entregado). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

TEMA 3. Radicales y carbenos.

1. Sentido del tema (Introducción)

En este tema se analizará la reactividad de especies carbonadas con electrones desapareados (radicales y carbenos). En la química de los radicales se estudiarán las reacciones de acoplamiento, de adición a especies insaturadas y de transposición; asimismo, se analizarán las reacciones de formación de enlaces C–C inter- e intramoleculares (reglas de Baldwin). En la parte dedicada a los carbenos, se describirán los tipos de carbenos y sus principales reacciones, destacando la reacción de metátesis de alquenos.

2. Epígrafes del tema.

Estructura. Preparación de radicales. Reacciones de radicales: acoplamiento, adición, fragmentación y transposiciones. Formación de enlaces C–C inter- e intramoleculares. Formación de radicales inducida por metales. Carbenos. Diazometano. Tipos de carbenos. Reacciones de carbenos: inserción en enlaces c–H, reordenamientos, metátesis.

3. Bibliografía

- Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S. *Organic Chemistry*; 2nd Ed.; Oxford University Press: Oxford (UK), 2012; Capítulos 37 y 38.
- Carey, F. A.; Sundberg, R. J. *Advanced Organic Chemistry*; 5th Ed.; Springer: New York, 2007; Volumen A, Capítulo 11 y Volumen B, Capítulo 10.

4. Actividades a desarrollar.

Resolver los ejercicios indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada (el alumno debe guardar una copia del trabajo entregado). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

TEMA 4. Reacciones fotoquímicas.

1. Sentido del tema (Introducción)

En este tema se describirán las principales reacciones orgánicas que transcurren bajo irradiación fotoquímica. Al tratarse de transiciones electrónicas, las especies más reactivas son las que tienen orbitales vacantes de baja energía como los compuestos carbonílicos, los compuestos con insaturaciones y los aromáticos.

2. Epígrafes del tema.

Principios generales. Estructura orbitalica y fotoquímica. Fotoquímica de compuestos carbonílicos, alquenos y dienos y compuestos aromáticos.

3. Bibliografía

- Carey, F. A.; Sundberg, R. J. *Advanced Organic Chemistry*; 5th Ed.; Springer: New York, 2007; Volumen A, Capítulo 12.

- Smith, M. B.; March, J. *March's Advanced Organic Chemistry*; 7th Ed.; Wiley: Chichester (UK), 2013; Capítulo 7.

4. Actividades a desarrollar.

Resolver los ejercicios indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada (el alumno debe guardar una copia del trabajo entregado). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

TEMA 5. Métodos sintéticos y aplicaciones.

1. Sentido del tema (Introducción)

En este tema se analizarán los conceptos básicos de la síntesis orgánica y se estudiarán ejemplos destacados. Se comenzará por la definición de equivalente sintético y un resumen de los principales grupos protectores de grupos funcionales reactivos. Se continuará con el concepto de análisis retrosintético y desconexiones, con un resumen de las principales reacciones de interconversión de grupos funcionales. El tema finaliza con la descripción de los principales conceptos de la síntesis asimétrica y con un estudio de ejemplos de síntesis totales.

2. Epígrafes del tema.

Introducción. Grupos protectores. Equivalentes sintéticos. Análisis retrosintético: desconexiones, quimioselectividad, interconversión de grupos funcionales. Síntesis asimétrica: chiral pool, auxiliares y reactivos quirales, catálisis asimétrica. Ejemplos.

3. Bibliografía

- Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S. *Organic Chemistry*; 2nd Ed.; Oxford University Press: Oxford (UK), 2012; Capítulos 23, 24, 28 y 41.
- Carey, F. A.; Sundberg, R. J. *Advanced Organic Chemistry*; 5th Ed.; Springer: New York, 2007; Volumen B, Capítulo 13.

4. Actividades a desarrollar.

Resolver los ejercicios indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada (el alumno debe guardar una copia del trabajo entregado). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

5. - Indicaciones metodológicas y atribución de carga ECTS.

5.1. Atribución de créditos ECTS.

TRABAJO PRESENCIAL EN EL AULA	HORAS	TRABAJO PERSONAL DEL ALUMNO	HORAS
Clases expositivas en grupo grande	18	Estudio autónomo individual o en grupo	28
Clases interactivas en grupo reducido (Seminarios)	4	Resolución de ejercicios, u otros trabajos	15
Tutorías en grupo muy reducido	2	Preparación de presentaciones orales, escritas, elaboración de ejercicios propuestos. Actividades en biblioteca o similar	8
Total horas trabajo presencial en el aula o en el laboratorio	24	Total horas trabajo personal del alumno	51

5.2. Actividades formativas en el aula con presencia del profesor

A) *Clases expositivas en grupo grande*: Lección impartida por el profesor que puede tener formatos diferentes (teoría, problemas y/o ejemplos generales, directrices generales de la materia...). El profesor puede contar con apoyo de medios audiovisuales e informáticos pero, en general, los estudiantes no necesitan manejarlos en clase. Habitualmente estas clases seguirán los contenidos de un *Manual de referencia* propuesto en la *Guía Docente* de la asignatura. La asistencia a estas clases no es obligatoria, pero resulta muy recomendable.

B) *Clases interactivas en grupo reducido*: Clase teórico/práctica en la que se proponen y resuelven aplicaciones de la teoría, problemas, ejercicios... El alumno participa activamente en estas clases de distintas formas: entrega de ejercicios al profesor (algunos de los propuestos en *boletines de problemas* que el profesor entrega a los alumnos con la suficiente antelación); resolución de ejercicios en el aula, etc. El profesor puede contar con apoyo de medios audiovisuales e informáticos pero, en general, los estudiantes no los manejarán en clase. Se incluyen las pruebas de evaluación si las hubiere. La asistencia a estas clases es obligatoria.

C) *Tutorías de pizarra en grupo muy reducido*: Tutorías programadas por el profesor y coordinadas por el Centro. En general, supondrán para cada alumno 2 horas por cuatrimestre y asignatura. Se proponen actividades como la supervisión de trabajos dirigidos, aclaración de dudas sobre teoría o las prácticas, problemas, ejercicios, lecturas u otras tareas propuestas; así como la presentación, exposición, debate o comentario de trabajos individuales o realizados en pequeños grupos. En muchos casos el profesor exigirá a los alumnos la entrega de ejercicios previa a la celebración de la tutoría. Estas entregas vendrán recogidas en el calendario de actividades que van a realizar los alumnos a lo largo del curso en la *Guía Docente* de la asignatura correspondiente. La asistencia a estas clases es obligatoria.

5.3. Recomendaciones para el estudio de la materia

- Es muy importante asistir a las clases expositivas.
- Es fundamental mantener el estudio de la materia "al día".

- Una vez finalizada la lectura de un tema en el manual de referencia, es útil hacer un resumen de los puntos importantes.
- La resolución de problemas es clave para el aprendizaje de esta materia. Puede resultar de ayuda empezar por los problemas resueltos en los manuales de apoyo y de referencia, para seguir después con los problemas propuestos al final de cada capítulo en el Manual de referencia.

- **5.4. Calendario de actividades.**

6. Indicaciones sobre la evaluación.

6.1. Procedimiento de evaluación.

La evaluación de esta materia se hará mediante evaluación continua y la realización de un examen final, estando condicionado el acceso al examen a la participación en al menos el 80% de las actividades docentes presenciales de asistencia obligatoria (seminarios y tutorías).

La evaluación continua (N1) tendrá un peso del 40% en la calificación de la asignatura y constará de dos componentes: clases interactivas en grupo reducido (seminarios) y clases interactivas en grupo muy reducido (tutorías). Los seminarios y las tutorías incluirán los elementos siguientes: resolución de problemas y casos prácticos (20%), asistencia y participación (8%) y preguntas y cuestiones orales durante el curso (12%).

El examen final (N2) versará sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura.

La calificación del alumno se obtendrá cómo resultado de aplicar la fórmula siguiente:

$$\text{Nota final} = 0.4 \times N1 + 0.6 \times N2$$

Siendo N1 la nota numérica correspondiente a la evaluación continua (escala 0-10) y N2 la nota numérica del examen final (escala 0-10).

Los alumnos repetidores tendrán el mismo régimen de asistencia a las clases que los que cursan la asignatura por primera vez.

6.2. Recomendaciones de cara a la evaluación.

El alumno debe repasar los conceptos teóricos introducidos en los distintos temas utilizando el manual de referencia y los resúmenes. El grado de acierto en la resolución de los ejercicios propuestos proporciona una medida de la preparación del alumno para afrontar el examen final de la asignatura. Aquellos alumnos que encuentren dificultades importantes a la hora de trabajar las actividades propuestas deben acudir en las horas de tutoría del profesor, con el objetivo de que éste pueda analizar el problema y ayudar a resolver dichas dificultades. Es muy importante a la hora de preparar el examen resolver algunos de los ejercicios que figuran al final de cada uno de los capítulos del manual de referencia.

6.3. Recomendaciones de cara a la recuperación.

El profesor analizará con aquellos alumnos que no superen con éxito el proceso de evaluación, y así lo deseen, las dificultades encontradas en el aprendizaje de los contenidos de la asignatura. También les proporcionará material adicional (cuestiones, ejercicios, exámenes, etc.) para reforzar el aprendizaje de la materia.