

60450 - Estrategias en síntesis orgánica avanzada

Información del Plan Docente

Año académico: 2022/23

Asignatura: 60450 - Estrategias en síntesis orgánica avanzada

Centro académico: 100 - Facultad de Ciencias

Titulación: 543 - Máster Universitario en Química Molecular y Catálisis Homogénea

Créditos: 6.0

Curso: 1

Periodo de impartición: Primer semestre

Clase de asignatura: Obligatoria

Materia:

1. Información Básica

1.1. Objetivos de la asignatura

Esta asignatura se constituye como uno de los pilares básicos del *Máster Universitario en Química Molecular y Catálisis Homogénea*, puesto que en ella se proporcionan los conocimientos necesarios para abordar la síntesis de moléculas orgánicas a partir de precursores más sencillos. En esta asignatura se pretende que el alumno sea capaz de proponer procedimientos sintéticos que le permitan preparar moléculas nuevas, o ya existentes, empleando las herramientas que le proporcionan la Química Orgánica, la Química Organometálica y la Catálisis.

Estos planteamientos y objetivos están alineados con los siguientes Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) de la Agenda 2030 de Naciones Unidas (<https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/>), de tal manera que la adquisición de los resultados de aprendizaje de la asignatura proporciona capacitación y competencia para contribuir en cierta medida a su logro. Objetivo 3: Salud y bienestar, Objetivo 7: Energía asequible y no contaminante, Objetivo 13: Acción por el clima.

1.2. Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

La asignatura *Estrategias en Síntesis Orgánica Avanzada* se encuadra en el módulo obligatorio *Química Molecular y Catálisis*. Tiene carácter cuatrimestral y una carga lectiva de 6 ECTS: 3 ECTS teóricos, dedicados a clases teóricas y 3 ECTS de problemas con participación de los alumnos.

La investigación dirigida a la preparación de nuevas moléculas orgánicas con propiedades específicas es un área de gran interés tanto a nivel académico como industrial: productos farmacéuticos, cosméticos, nuevos materiales, polímeros, agroquímicos, colorantes, etc.

1.3. Recomendaciones para cursar la asignatura

Se recomienda el dominio de los conceptos básicos de la Química Orgánica: enlace, estructura y reactividad de los distintos grupos funcionales. Asimismo se recomienda que los alumnos posean conocimientos básicos en síntesis química, para un mejor seguimiento de las clases teóricas y de problemas.

La asistencia a clase y el trabajo continuado, especialmente la resolución de los problemas propuestos, facilita la superación de la asignatura.

2. Competencias y resultados de aprendizaje

2.1. Competencias

- Identificar las diferentes herramientas sintéticas accesibles para la preparación de moléculas orgánicas.
- Integrar los conocimientos en Química Orgánica, Organometálica y Catálisis y aplicarlos a la resolución de problemas relacionados con la síntesis orgánica.
- Diseñar rutas sintéticas razonables para la preparación de moléculas orgánicas partiendo de productos de partida comerciales o que se puedan preparar con facilidad. El alumno deberá ser capaz de predecir el resultado estereoquímico de una reacción así como de seleccionar los reactivos más adecuados basándose en criterios estructurales y mecanísticos.
- Asimilar y evaluar resultados de investigación en Química Molecular y Catálisis de forma objetiva y saber interpretarlos de forma crítica, relacionándolos con los conocimientos teóricos adquiridos.
- Elaborar protocolos experimentales de síntesis orgánica avanzada.

f) Aprender a buscar en la bibliografía y bases de datos procedimientos sintéticos y saber adaptarlos a un problema concreto.

2.2. Resultados de aprendizaje

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

- a) Conocer los principios del análisis retrosintético y saber aplicarlos a la síntesis de una molécula orgánica, relativamente compleja, a partir de productos de partida fácilmente accesibles.
- b) Conocer los procedimientos sintéticos habituales para construir esqueletos carbonados en moléculas orgánicas (cadenas abiertas, construcción de anillos, formación de enlaces carbono-carbono), así como para transformar unos grupos funcionales en otros.
- c) Utilizar de forma adecuada los principios de la química orgánica sintética, teniendo en cuenta la compatibilidad e incompatibilidad entre grupos funcionales.
- d) Comprender y tener una visión integrada de los mecanismos de las reacciones orgánicas para entender mejor los conceptos de quimioselectividad, regioselectividad y estereoselectividad.
- e) Resolver problemas y cuestiones relacionados con la síntesis orgánica.
- f) Proponer procedimientos sintéticos razonables para compuestos orgánicos de complejidad media, teniendo en cuenta la estereoquímica en cada una de las etapas.
- g) Analizar diferentes alternativas sintéticas para un mismo compuesto y defender de forma crítica cual es la más razonable.
- h) Analizar síntesis descritas en la bibliografía científica para moléculas complejas (productos naturales y otros productos de interés).
- i) Obtener información de fuentes bibliográficas, organizarla y analizarla de una manera crítica, elaborar informes y exponer las conclusiones obtenidas.
- j) Elaborar protocolos experimentales de síntesis orgánica avanzada.

2.3. Importancia de los resultados de aprendizaje

Uno de los desafíos más importantes para el químico sintético es la preparación de moléculas orgánicas, sean conocidas o no. Los resultados de aprendizaje de esta asignatura son importantes porque permitirán al estudiante proponer métodos de síntesis de una molécula objetivo teniendo en cuenta sus características estructurales. El alumno tendrá que ser capaz de hacer un juicio crítico para evaluar la viabilidad de los métodos sintéticos propuestos, así como proponer alternativas para aquellos casos en que la propuesta inicial no sea factible. Para ello tendrá que desarrollar su capacidad creativa a partir de los conocimientos adquiridos tanto en el Grado como en las diversas asignaturas del Máster, lo que contribuirá además a que se genere en el alumno el gusto por la investigación científica.

3. Evaluación

3.1. Tipo de pruebas y su valor sobre la nota final y criterios de evaluación para cada prueba

El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación: evaluación continua y/o prueba global.

1. Evaluación continua

1. Evaluación continua

A lo largo del semestre se realizarán dos pruebas parciales, P1 y P2, repartidas a lo largo del periodo docente. En dichos controles se resolverán problemas de síntesis orgánica y/o cuestiones teórico-prácticas relacionadas. El primer parcial se llevará a cabo en el mes de noviembre y el segundo tras las vacaciones de navidad, antes del periodo oficial de exámenes.

Asimismo, se evaluará el aprendizaje progresivo mediante la resolución de problemas, tareas a través de la plataforma Moodle, discusión en las clases de problemas o propuestas específicas planteadas a lo largo del curso, lo que permitirá la obtención de una nota de problemas (Pr).

La calificación final se obtendrá aplicando la siguiente fórmula:

$$\text{Calificación final} = 0,3 \times P1 + 0,5 \times P2 + 0,2 \times Pr$$

Para superar la asignatura se deberá obtener una calificación mínima de 5 (sobre 10).

Debido al tipo de asignatura las pruebas parciales no eliminan materia.

2.- Prueba Global

Los alumnos que no se acojan al sistema de evaluación continua, que no superen la asignatura por este procedimiento o que quieran mejorar su calificación, tendrán derecho a presentarse a una prueba global que consistirá en un único examen escrito de contenido teórico-práctico. Para aprobar será necesario alcanzar una calificación mínima de 5 puntos (sobre 10).

La calificación final del alumno será **la mejor de las calificaciones obtenidas entre la evaluación continua y la prueba global**.

Para la realización, tanto de los exámenes parciales como de la prueba global, se permitirá el uso de modelos moleculares y los apuntes de la asignatura o libros de texto.

El número de convocatorias oficiales de examen a las que la matrícula da derecho (2 por matrícula) así como el consumo de dichas convocatorias se ajustará a la Normativa de Permanencia en Estudios de Máster y al Reglamento de Normas de

Evaluación del Aprendizaje (<https://ciencias.unizar.es/normativas-asuntos-academicos>).

A este último reglamento, también se ajustarán los criterios generales de diseño de las pruebas y sistema de calificación, y de acuerdo con la misma se hará público el horario, lugar y fecha en que se celebrará la revisión al publicar las calificaciones.

4. Metodología, actividades de aprendizaje, programa y recursos

4.1. Presentación metodológica general

- 1.- Clases teóricas (3 ECTS).
- 2.- Clases de problemas y seminarios (3 ECTS).

4.2. Actividades de aprendizaje

Actividad formativa de adquisición de conocimientos avanzados de diseño y síntesis orgánica. Esta actividad comprende 30 horas presenciales de clases expositivas-interactivas en el aula.

Actividad formativa de clases de resolución de problemas y seminarios. Esta actividad comprende 30 horas de clases presenciales en las que los alumnos, de forma individual o en grupo, resolverán casos prácticos.

Tutorías. Los alumnos dispondrán de 3 horas semanales para tutorías individualizadas.

Las actividades docentes y de evaluación se llevarán a cabo de modo presencial salvo que, debido a la situación sanitaria, las disposiciones emitidas por las autoridades competentes y por la Universidad de Zaragoza obliguen a realizarlas de forma telemática o semi-telemática con aforos reducidos rotatorios.

4.3. Programa

El programa teórico de la asignatura consta de los siguientes bloques temáticos:

Tema 1. *Las bases del análisis retrosintético.*

Análisis retrosintético. Metodología. Desconexiones. Concepto de sintón. Sintones electrófilos. Sintones nucleófilos. Equivalentes sintéticos. Tipos de transformaciones. Consideraciones económicas en el análisis retrosintético. Productos de partida.

Tema 2. *Formación de enlaces sencillos carbono-carbono.*

Carbaniones tipo d¹. Carbaniones tipo d²: síntesis via enolatos. Alquilación. Alquilación de compuestos con metilenos activos. Alquilación de compuestos 1,3-dicarbonílicos. Condensación aldólica. Adiciones tipo Michael. Carbaniones tipo d: síntesis via organometálicos. Compuestos organolitados y organomagnesianos. Compuestos organocupratos.

Sustituciones, adiciones y adiciones conjugadas. Síntesis mediadas por paladio. Reacciones de acoplamiento. Reacciones con complejos p-alil paladio.

Tema 3. *Formación de enlaces múltiples carbono-carbono.*

Síntesis de alquenos. Reacciones de eliminación. Reacciones de condensación de carbonilos con iluros y otros carbaniones. Síntesis de alquinos. Reacciones de eliminación. Reacciones de condensación.

Tema 4. *Formación de compuestos cíclicos.*

Ciclopropanos: adición de carbenos. Ciclopentanos. Ciclohexanos y ciclohexenos: cicloadiciones [4+2]. Anelación de Robinson. Síntesis mediada por carbenos metálicos, reacción de metátesis con cierre de anillo.

Tema 5. *Grupos protectores en síntesis.*

Protección de grupos hidroxilo: formación de éteres, ésteres, dioles. Protección de ácidos carboxílicos: formación de ésteres. Protección de grupos amino: formación de amidas, carbamatos y aminas sustituidas. Protección de grupos carbonilo: formación de acetales, tioacetales y derivados enólicos.

Tema 6. *Reacciones de reducción y oxidación.*

Oxidación de alcoholes. Oxidaciones con Cr(VI). Oxidaciones con RuO₄. Oxidaciones con DMSO. Oxidación de Dess-Martin. Oxidación de alquenos. Dihidroxiación de alquenos. Epoxidación de alquenos. Ruptura oxidativa de alquenos y glicoles. Oxidación de enolatos. Reacción de Baeyer-Villiger. Otras oxidaciones.

Hidrogenación catalítica. Hidrogenaciones en ausencia de hidrógeno. Reducciones con hidruros metálicos del grupo 13 (B, Al). Reducciones con metales activos. Desoxigenación de grupos carbonilo. Otras reducciones.

4.4. Planificación de las actividades de aprendizaje y calendario de fechas clave

Los horarios de la asignatura y fechas de los exámenes se publican en la página web de la Facultad de Ciencias: <https://ciencias.unizar.es/calendario-y-horarios> y en la página web del Máster: <http://masterqmch.unizar.es>.

En reprografía y/o a través del Anillo Digital Docente se proporcionará a los alumnos diverso material docente preparado por los profesores de la asignatura (<https://moodle2.unizar.es/add>).

La asignatura Estrategias en Síntesis Orgánica Avanzada se cursará durante el primer semestre, al igual que las otras tres asignaturas obligatorias del Máster y las optativas Metodologías Fundamentales de Síntesis y Recursos Bibliográficos y Bases de Datos.

A lo largo del curso se realizarán 2 pruebas parciales, correspondiendo cada una de ellas aproximadamente a la mitad de la materia. Las fechas de realización y presentación tanto de las pruebas parciales, como de la prueba global se comunicarán al principio de curso.