

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

<b>Código</b>	44705
<b>Nombre</b>	Química orgánica avanzada
<b>Ciclo</b>	Máster
<b>Créditos ECTS</b>	4.0
<b>Curso académico</b>	2022 - 2023

**Titulación(es)**

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2226 - M.U. en Química Orgánica	Facultad de Química	1	Anual

**Materias**

Titulación	Materia	Caracter
2226 - M.U. en Química Orgánica	1 - Química orgánica avanzada	Obligatoria

**Coordinación**

Nombre	Departamento
DEL POZO LOSADA, CARLOS	325 - Química Orgánica

**RESUMEN**

La “Química Orgánica Física” (2 créditos) junto con Fotoquímica (2 créditos) constituyen la materia Química Orgánica Avanzada. Esta materia proporciona una profundización en diferentes aspectos de la Química Orgánica que ya se han estudiado con anterioridad, con el fin de situar al alumno en condiciones para abordar aspectos más complejos de la Química Orgánica, en especial en aquellos que resulten de interés en la industria Química o Farmacéutica.

En esta asignatura se trata de avanzar en el conocimiento del enlace químico y en diferentes tópicos relacionados con el conocimiento teórico de las reacciones pericíclicas, incluyendo las reacciones electrocíclicas, cicloadiciones y transposiciones sigmatrópicas. También se estudia la teoría de las perturbaciones como una herramienta para explicar la selectividad de las reacciones

La “Química Orgánica Física” (2 créditos) junto con Fotoquímica (2 créditos) constituyen la materia Química Orgánica Avanzada. Esta materia proporciona una profundización en diferentes aspectos de la Química Orgánica que ya se han estudiado con anterioridad, con el fin de situar al alumno en condiciones para abordar aspectos más complejos de la Química Orgánica, en especial en aquellos que resulten de interés en la industria Química o Farmacéutica.



En esta asignatura se trata de avanzar en el conocimiento del enlace químico y en diferentes tópicos relacionados con el conocimiento teórico de las reacciones pericíclicas, incluyendo las reacciones electrocíclicas, cicloadiciones y transposiciones sigmatrópicas. También se estudia la teoría de las perturbaciones como una herramienta para explicar la selectividad de las reacciones

## CONOCIMIENTOS PREVIOS

### Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

### Otros tipos de requisitos

Conocimientos de Química Orgánica y Química Física a nivel de grado

## COMPETENCIAS

### 2226 - M.U. en Química Orgánica

- Que los/las 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.
- Que los/las estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- Que los/las 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.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- 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.
- Utilizar las distintas técnicas de exposición -oral, escrita, presentaciones, paneles, etc- para comunicar sus conocimientos, propuestas y posiciones.
- Ser capaces de acceder a herramientas de información en otras áreas del conocimiento y utilizarlas apropiadamente.
- Saber participar en debates y discusiones, dirigirlos y coordinarlos y ser capaces de resumirlos y extraer de ellos las conclusiones más relevantes y aceptadas por la mayoría.



- Poseer habilidades sociales, un buen nivel de comunicación oral y escrita, así como capacidad para trabajar en equipo y con personas de diferentes procedencias.
- Competencias de gestión tales como la capacidad para la planificación y gestión de tiempo y recursos, así como para dirigir y tomar decisiones.
- Ser capaces de valorar la necesidad de completar su formación científica, en lenguas, en informática, asistiendo a conferencias o cursos y/o realizando actividades complementarias, autoevaluando la aportación que la realización de estas actividades supone para su formación integral.
- Afianzar y profundizar en aquellos temas relacionados con la estereoquímica de las moléculas orgánicas y la descripción del enlace químico.
- Alcanzar un conocimiento profundo de los aspectos teóricos de las reacciones pericíclicas.
- Conocer los fundamentos de las reacciones fotoquímicas, en especial de los compuestos orgánicos, y sus aplicaciones en síntesis.

## RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Los resultados a conseguir en esta asignatura son:

- Un conocimiento profundo en aspectos de la Química Orgánica que ya se han estudiado con anterioridad, con el fin de situar al alumno en condiciones para abordar aspectos más complejos de la Química Orgánica.
- Un dominio de aspectos de aplicación de la Química Orgánica de interés en la industria Química o Farmacéutica.

En concreto, los objetivos a conseguir en esta asignatura son:

- Afianzar y profundizar conocimientos sobre tópicos relacionados con la estereoquímica de las moléculas orgánicas y la descripción del enlace químico.
- Afianzar y profundizar los aspectos físico-químicos de las reacciones orgánicas.
- Alcanzar un mayor conocimiento sobre los aspectos teóricos de las reacciones pericíclicas y sus aplicaciones en síntesis
- Diseñar, seleccionar y/o desarrollar productos y procesos químicos eficientes (ODS 7) y que minimicen su impacto sobre el medio ambiente (ODS 14 y 15), aprovechen materias primas alternativas y generen una menor cantidad de residuos (ODS 11).



## DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

### 1. Estructura y enlace

Descripción teórica del enlace químico. Teoría de orbitales moleculares. Conjugación  $\pi$ . Hiperconjugación. Orbitales moleculares localizados. Interacciones no covalentes. Efectos estereoelectrónicos. Conformaciones

### 2. Teoría de las perturbaciones

Reactividad química: teoría de las perturbaciones. Ecuación de Salem-Klopman. Intermedios reactivos. Reacciones iónicas, radicalarias y pericíclicas.

### 3. Reacciones electrocíclicas

Reacciones electrocíclicas. Movimientos conrotatorio y disrotatorio. Diagramas de correlación: reglas de selección. Aproximación de los orbitales de frontera. Aproximación de estado de transición aromático.

### 4. Cicloadiciones

Cicloadiciones. Reglas de selección. Reacción de Diels-Alder: regio y estereoselectividad. Cicloadiciones 1,3-dipolares

### 5. Transposiciones sigmatrópicas

Transposiciones sigmatrópicas. Migraciones  $[1,j]$  de hidrógeno. Migraciones  $[1,j]$  de otros grupos. Transposiciones sigmatrópicas  $[3,3]$ : Transposiciones de Claisen y Cope. Transposiciones sigmatrópicas  $[2,3]$  en sistemas aniónicos. Reacciones eno y retroeno. Reglas de selección.

### 6. Fotoquímica

Leyes básicas. Procesos primarios y secundarios. Características de las reacciones fotoquímicas.

### 7. Estados excitados

Propiedades estáticas y dinámicas de los estados excitados. Transiciones radiativas y no radiativas. Procesos de transferencia de energía. Procesos de transferencia de carga

**8. Aspectos experimentales**

Fuentes de luz. Reactores fotoquímicos. Selección de la longitud de onda.

**9. Fotoquímica del grupo carbonilo**

Introducción. Reacción Norrish I. Abstracción de H. Reacción Norrish II. Paterno Buchi.

**10. Fotoquímica de alquenos**

Introducción. Isomerización Z-E. Transposición di-metano. Transposiciones sigmatrópicas y vía carbenos

**11. Fotoquímica de compuestos aromáticos**

Introducción. Isomerización de anillo. Fotoadiciones. Fotocicloadiciones. Fotodimerizaciones. Fotosustitución aromática. Fotociclaciones. Reacciones de la cadena lateral.

**12. Fotoquímica de compuestos nitrogenados**

Iminas. Sales de iminio. Óxidos y compuestos relacionados. Nitritos. Nitrocompuestos. Azocompuestos. Diazocompuestos. Azidas.

**13. Fotooxigenaciones**

Especies reactivas de oxígeno. Oxigenaciones con oxígeno triplete. Oxigenaciones con oxígeno singlete. Oxidaciones con oxígeno anión radical

**VOLUMEN DE TRABAJO**

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	20,00	100
Seminarios	20,00	100
<b>TOTAL</b>	<b>40,00</b>	

**METODOLOGÍA DOCENTE**

La asignatura está planteada para que el estudiante sea el protagonista de su propio aprendizaje y desde el principio de curso los estudiantes dispondrán de todo el material didáctico correspondiente al curso.



La metodología empleada combinará clases presenciales, discusión y análisis de ejemplos seleccionados y/o casos prácticos así como el empleo de medios audiovisuales y otros recursos electrónicos.

La docencia se estructura de la siguiente manera:

**Clases magistrales (presenciales).**- En estas clases se introducirán los conceptos básicos y las perspectivas de la Química Orgánica Física. En ellas, se expondrán los contenidos fundamentales de cada tema.

**Seminarios.**- Esta actividad docente estará dedicada a la resolución de problemas y cuestiones con la participación activa del estudiante. Se prevé también la discusión de artículos científicos relacionados con los temas estudiados.

**Trabajos.**- Adicionalmente, cuando el profesor lo considere oportuno, se propondrán trabajos relacionados con alguno de los temas del programa y descritos en una publicación científica

## EVALUACIÓN

La evaluación de la asignatura se llevará a cabo de una forma continua por parte del profesorado a lo largo del curso y constará de los siguientes apartados.

**Evaluación directa del profesor.** Un 20% de la nota procederá de la evaluación directa del profesor en las clases de teoría y en los seminarios. En esta evaluación se tendrán en cuenta distintos aspectos, entre los que cabe destacar:

- Asistencia y participación razonada y clara en las discusiones planteadas.
- Progreso en el uso del lenguaje propio de la química orgánica física.
- Resolución de problemas y planteamiento de dudas.
- Espíritu crítico.
- Entrega de ejercicios o trabajos.

**Evaluación del trabajo realizado por el estudiante.** Se tendrá en cuenta tanto el contenido como la forma. A este apartado le corresponderá un 25% de la nota final.

**Exámenes y pruebas escritas.** Un 80% de la nota se obtendrá a partir de los resultados de las pruebas escritas.

- Exámenes presenciales de estilo tradicional tanto de cuestiones teóricas como de problemas, y de contenidos relacionados con la materia. Estas cuestiones y problemas serán de tal naturaleza que obliguen al estudiante a relacionar aspectos diferentes que aparezcan en distintos temas de la asignatura.
- Exámenes no presenciales en los que el profesor entrega directamente, o bien envía mediante correo electrónico, una serie de cuestiones o ejercicios que habrán de ser resueltas por los estudiantes. El estudiante deberá enviar las respuestas al profesor por el mismo conducto antes mencionado y en el plazo que dicho profesor establezca.



## REFERENCIAS

### Básicas

- Principles of Molecular Photochemistry: An Introduction, N.J. Turro, J.C. Scaiano, V. Ramamurthy, University Science Books, 2009.
- Modern Molecular Photochemistry of Organic Molecules, N.J. Turro, J.C. Scaiano, V. Ramamurthy, University Science Books, 2010.
- CRC Handbook of Organic Photochemistry and Photobiology (2 volúmenes), 3rd Edition, Editado por A. G. Griesbeck, M. Oelgemöller y F. Getti, CRC Press, 2012.

### Complementarias

- Glosario de Términos Usados en Fotoquímica. Comisión de Fotoquímica de la IUPAC, 1996. Universitat Autònoma de Barcelona. Servei de Publicacions Bellaterra, 1999.