

DATOS DE LA ASIGNATURA					
Titulación:	LICENCIADO EN QUÍMICA			Plan:	2004
Asignatura:	Química de los Heterociclos			Código:	8034
Tipo:	Obligatoria	Curso:	4º	Créditos ECTS:	4.725
Créditos Totales LRU:	Créditos 4.5	Teóricos:	3	Prácticos:	1.5
Descriptor (BOE):					
Departamento:	Ing. Química	Área de Conocimiento:	Q. Orgánica		
Prerrequisitos:	Haber cursado la Química Orgánica de segundo curso de esta Licenciatura				

PROFESORADO		Ubicación	Teléfono
Responsable:	Argimiro Llamas Marcos ( <a href="mailto:llamas@uhu.es">llamas@uhu.es</a> )	Fac. de Ciencias Experimentales	959-219996
Otros:			

DOCENCIA EN EL CURSO 2007-2008	
<b>Contexto de la asignatura</b>	<p><b>Descriptor:</b> heterociclos, nomenclatura de heterociclos, síntesis, reactividad, aplicaciones de heterociclos.</p> <p><b>Presentación de la asignatura:</b> Los heterociclos están presentes en la vida diaria y, cada vez, en mayor extensión ya que se incluyen en ellos compuestos esenciales para la vida, como las bases púricas y pirimidínicas, coenzimas como NAD; productos naturales con acciones fisiológicas diversas como los alcaloides o los antibióticos, lactámicos; fármacos antivíricos, antitumorales, agentes antihipertensión, etc ; materiales poliméricos conductores.</p> <p>Por ello, el estudio de estos compuestos en conjunto resulta muy interesante.</p>
<b>Objetivo General de la Asignatura:</b>	1. Conocer los aspectos generales de nomenclatura de heterociclos, revisar los procesos sintéticos y reacciones químicas de los principales sistemas heterociclos, aplicaciones, importancia, y caracterización mediante técnicas espectroscópicas.

<b>Competencias y destrezas teórico-prácticas a adquirir por el alumno:</b>	<b>Programa de clases prácticas:</b> Seminarios, problemas, búsquedas bibliográficas y trabajos relacionados con la teoría. Se llevarán a cabo actividades en microaula: búsqueda de información en internet, acceso a bibliografía en línea, uso de tutoriales...
<b>Contribución al desarrollo de habilidades y destrezas Genéricas:</b>	Desarrollar su capacidad de trabajos en grupo, discusión de síntesis reales de estructuras de moléculas orgánicas de heterociclos
<b>Recomendaciones</b>	<b>Conocimientos previos necesarios:</b> Al ser una asignatura de segundo ciclo es imprescindible poseer los conocimientos correspondientes a la Química Orgánica de segundo curso. <b>Conocimientos, habilidades y destrezas que debe adquirir el alumno:</b> <b>Saber</b> nombrar correctamente los nombres triviales de heterociclos aceptados por la IUPAC. Utilizar el sistema de prefijos y sufijos de Hantzsch-Widman. Conocer y aplicar las reglas de nomenclatura para anillos fusionados. Ser capaz de plantear síntesis sencillas y comprender la reactividad de los mismos de manera que pueda solucionar ejercicios que exijan transformaciones entre compuestos heterocíclicos u obtención de unos sistemas a partir de otros. Destreza en la búsqueda de información y en el uso de nuevas tecnologías. Aprender a reconocer un sistema heterociclo. Reconocer la importancia de estos sistemas en moléculas biológicamente activas y en la fabricación de nuevos materiales.

**Tema 1. Introducción y clasificación de los heterociclos**

Introducción. Nomenclatura de los compuestos heterociclos. Nombres triviales de sistemas anulares comunes. Nomenclatura de Hantzsch-Widman. Nomenclatura de sistemas anulares fusionados.

**Tema 2. Heterociclos aromáticos**

Introducción. Heterociclos aromáticos. Criterios de aromaticidad. Heterociclos aromáticos  $\pi$ -deficientes y  $\pi$ -excedentes. Otros heterociclos con carácter aromático. Heterociclos antiaromáticos. Tautomería en compuestos heterocíclicos. Reactividad de compuestos heteroaromáticos.

**Tema 3. Heterociclos no aromáticos**

Introducción. Tensión de ángulos de enlace en carbociclos. Tensión de ángulos de enlace en heterociclos. Torsión de enlace. Conformaciones preferentes en heterociclos flexibles. Interacciones de tipo atractivo a través del espacio.

**Tema 4. Síntesis de heterociclos I. Reacciones de ciclación**

Introducción. Diseño de síntesis de un heterociclo. Reacciones de ciclación intramoleculares. Ciclaciones intramoleculares nucleófilo-electrófilo. Ciclaciones radicalarias. Ciclaciones vía carbeno y vía nitreno.

**Tema 5. Síntesis de heterociclos II. Reacciones Pericíclicas**

Introducción. Tipos de reacciones Pericíclicas. Cicloadiciones 1,3-dipolares: reactividad, selectividad y aplicaciones. Cicloadiciones [4+2] o reacciones hetero Diels-Alder. Cicloadiciones [2+2]. Reacciones electrocíclicas. Reacciones quelotrópicas. Reacciones eno.

**Tema 6. Heterociclos de tres y cuatro miembros**

Introducción. Anillos de tres eslabones con un heteroátomo: aziridinas, 2H-azirinas, oxiranos, tiiranos: síntesis y reactividad. Anillos de tres eslabones con dos heteroátomos: diaziridinas y 3H-diazirinas, oxaziridinas: síntesis y reactividad. Aplicaciones de los compuestos con anillos de tres eslabones y dos heteroátomos. Anillos de cuatro eslabones con un heteroátomo.

**Tema 7. Heterociclos de cinco miembros con un heteroátomo y derivados fusionados**

Introducción. Pirrol, furano y tiofeno: características generales. Pirroles: síntesis, reactividad, porfirinas. Furanos: síntesis, reactividad, furanos naturales. Tiofenos: síntesis, reactividad, tiofenos naturales. Indoles: síntesis, reactividad, indoles naturales. Benzo[b]furanos y benzo[b]tiofenos: síntesis y reactividad. Carbazoles. Heterociclos benzo[c]condensados: síntesis, reactividad, ftalocianinas.

**Tema 8. Heterociclos de seis miembros con un heteroátomo y derivados fusionados**

Introducción. Piridinas: síntesis, reactividad, dihidropiridinas, N-óxidos, N-imidas, N-iluros, hidroxí y aminopiridinas, alquil y alquencilpiridinas, ácidos piridincarboxílicos. Quinoleinas e isoquinoleinas. Otras piridinas fusionadas. Sistemas anulares que contienen oxígeno: sales de pirilio, pironas. Benzopiranos.

**Tema 9. Heterociclos de cinco miembros con dos heteroátomos y derivados fusionados**

Introducción. Azoles: características generales. Imidazoles. Pirazoles. Triazoles y tetrazoles. Benzodiazoles y benzotriazoles. Oxazoles, tiazoles y sus benzoderivados. Isoxazoles, isotiazoles y sus benzoderivados. Oxadiazoles, tiadiazoles y sistemas relacionados. Betainas y compuestos mesoiónicos.

**Tema 10. Heterociclos de seis miembros con dos o más heteroátomos y derivados fusionados**

Introducción. Aspectos generales de la química de diazinas, triazinas y tetrazinas. Pirimidinas y purinas: síntesis y reactividad. Otras diazinas, triazinas y tetrazinas. Sistemas fusionados. Oxazinas y tiazinas.

**Tema 11. Heterociclos de siete miembros y derivados fusionados**

Introducción. Azepinas, oxepinas, tiepinas: síntesis y reactividad. Diazepinas y benzodiazepinas: síntesis y reactividad.

<b>Competencias a adquirir por unidades temáticas</b>	VER ANEXO 1					
<b>Metodología Docente Empleada:</b>	<p><b>Metodología docente</b></p> <p>Las actividades docentes organizadas para la enseñanza de la asignatura "Determinación Estructural" de moléculas orgánicas consisten en:</p> <p><b>Clases teóricas</b>, encaminadas a orientar a los alumnos en el aprendizaje de las teorías y conceptos fundamentales que constituyen el cuerpo de la disciplina. Con este fin, se hará uso de las nuevas tecnologías, pudiendo el alumno acceder, si así lo desea, al material utilizado en clase a través de red campus (<a href="http://www.es">www.es</a>).</p> <p><b>Actividades dirigidas</b>, consistentes, fundamentalmente, en clases de problemas y aplicaciones prácticas de la teoría y cuya finalidad es afianzar, desarrollar y completar los conocimientos adquiridos en las clases de teoría.</p> <p><b>Tutorías</b>, en las que cada alumno podrá dirigirse al profesor de la asignatura para aclarar cualquier duda conceptual o metodológica surgida en el estudio de la disciplina y no resuelta con las actividades anteriormente citadas.</p> <p><b>Otras actividades</b>, el profesor de la asignatura, de forma individual o de acuerdo con los alumnos, podrán programar otras actividades tales como conferencias, proyecciones, etc., con objeto de mejorar al máximo la enseñanza de la asignatura.</p> <p>Todas las actividades anteriormente indicadas tendrán carácter voluntario y serán evaluables.</p>					
<b>Criterios de Evaluación:</b>	<p>Evaluación</p> <p>1.-Se valorarán los ejercicios realizados en la pizarra por los alumnos a lo largo del curso. Además, durante el curso se realizarán, de forma voluntaria, ejercicios prácticos que serán evaluados y calificados por el profesor.</p> <p>2.- Se realizará un examen parcial correspondiente a los 6 primeros temas. Para eliminar materia del examen parcial será necesario obtener un mínimo de 5 puntos y su valor será el 40% de la nota final.</p> <p>3.- Se realizará un segundo examen parcial hasta completar el temario. Al igual que en el primer parcial será necesario obtener una calificación de 5 para eliminar materia, y su valor será del 40% de la nota final. El 20% restante corresponde a las actividades dirigidas.</p>					
<b>Temario Práctico y Planificación Temporal:</b>	Se propone una colección de problemas para sintetizar de forma retrosintética estructuras de compuestos conocidos correspondiente a la farmacología o de los compuestos fitosanitarios.					
<b>Distribución ECTS</b>	Horas presenciales		Horas de Estudio		Otras Actividades Académicamente Dirigidas (Especificar)	Exámenes (incluyendo preparación)
	Teoría	Problemas	Teoría	Problemas	23 (tutorizada) VER ANEXO 2	
<b>CRONOGRAMA</b>	VER ANEXO 3					

<p><b>Bibliografía Fundamental:</b></p>	<p><b>Bibliografía:</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. S. Esteban, P. Cornago, C. Barthélemy "Química Orgánica Heterocíclica". U.N.E.D., Madrid, 1992.</li> <li>2. T.L. Gilchrist "Química Heterocíclica". 2 ed. Addison-Wesley Iberoamericana, USA, 1995.</li> <li>3. R. R. Gupta, M. Kumar, V. Gupta "Heterocyclic Chemistry I: Principles, Three and Four-Membered Heterocycles". Springer, Berlín, 1998; y "Heterocyclic Chemistry II: Five-Membered Heterocycles". Springer, Berlín, 1999</li> <li>4. T.L. Gilchrist "Heterocyclic Chemistry". 3er ed. Longman, UK, 1997.</li> <li>5. J.A. Joule, G.F. Smith "Heterocyclic Chemistry". 2 ed. Van Nostrand Reinhold, UK, 1987.</li> <li>6. J.A. Joule, K. Mills, G.F. Smith "Heterocyclic Chemistry". 3 ed. Chapman &amp; Hall, London, 1995.</li> <li>7. L.A. Paquete "Fundamentos de Química Heterocíclica". Limusa, México, 1992.</li> <li>8. D.W. Young "Química de los Heterociclos". Alhambra, Madrid, 1978.</li> <li>9. A.F. Pozharskii, A.T. Soldatenkov, A.R. Katritzky "Heterocycles in Life and Society, An Introduction to Heterocyclic Chemistry and Biochemistry and the Role of Heterocycles in Science, Technology, Medicine and Agriculture". Wiley, 1997.</li> <li>10. T. Eicher, S. Hauptmann "The Chemistry of Heterocycles, Structure, Reactions, Synthesis and Applications". Thieme, Leipzig, 1995.</li> <li>11. P. Metz "Stereoselective Heterocyclic Synthesis I" n° 189 de Topics in Current Chemistry. Springer, Berlín, 1997.</li> <li>12. P. Metz Ed. "Stereoselective Heterocyclic Synthesis". Springer, Berlín, 1999.</li> </ol>
<p><b>Bibliografía Complementaria</b></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- G. R. Newkome, W. W. Pandler "Contemporary Heterocyclic Chemistry. Syntheses, Reactions a- Gilchrist, t. I. "Química Heterocíclica". 2 º edición, addison-wesley iberoamericana, 1995.</li> <li>- Gilchrist, t. I. "heterocyclic chemistry". Third Edition. Longman Adissson Wesley, 1997.</li> <li>and Applications". John Wiley &amp; sons, New York, 1982.</li> </ul>

Anexo 1

*Relación de Actividades Académicas Dirigidas al estudio de las reacciones principales encaminadas a la síntesis de moléculas de heterociclos de tamaños diferentes.*

Se realizarán según el cronograma, para las distintas sesiones. Las AAD se realizarán sobre los distintos bloques temáticos de la asignatura, y lógicamente contribuirán de manera significativa a alcanzar las competencias indicadas en los bloques temáticos.

D1. Resolución de problemas por grupos. Puesta en común de los cuellos de botella encontrados. Tutoría del compañero para resolver esas dificultades. Los alumnos crean y resuelven enunciados de problemas. Fomenta la asimilación de los conceptos básicos, la aplicación de la teoría a la práctica, el trabajo en equipo y la destreza mental. Estimula de forma sana la competencia.

D2. Resolución de cuestiones teóricas, tipo examen, por grupos. Puesta en común de los conceptos de más difícil comprensión. Aclaración de esos conceptos en bases a la resolución de cuestiones cortas. Es un ejercicio que fomenta la autoevaluación de conocimientos y del grado de asimilación de los conceptos fundamentales de la materia.

D3. Búsqueda en la bibliografía de aplicaciones de interés científico relacionadas con el tema tratado en clase. Se discute su relación con los conceptos básicos explicados en teoría. Valoración de interés y novedad. Relación con otras disciplinas de la carrera.

### Anexo 3. Cronograma

#### Unidades temáticas: (las horas por unidad incluyen teoría + problemas)

Dedicación presencial (incluye actividades dirigidas)

Actividad	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12
Clases teóricas	B1	B1	B2	B2	B2	B3	B3	B3	B3	B3	B3	B3
Clases problemas		B1		B2	B2		B3	B3	B3	B3		B3
Actividades dirigidas		Todos Organi zación	G1 D1	G2 D1	G3 D1	G4 D1	G1 D2	G2 D2	G3 D2	G4 D2	G1 D3	G2 D3

Según consta en la tabla de adaptación ECTS de primer curso:

(S1, S2,

S3... : semana 1, semana 2, semana 3...)

Clases teóricas: (42). 3 horas semanales según horario

Cclases de problemas: 11 horas, una hora semanal según horario.

Actividades Académicas Dirigidas: 23 horas; dos sesiones semanales de una hora, con los distintos grupos y con la frecuencia indicada en cronograma. Cada grupo de Teoría (24) se dividirá en 3 grupos de 8 alumnos (G1, G2, G3). G = grupo completo.

(NOTA: el segundo cuatrimestre del curso 2004/2005 tiene 15 semanas)

Dedicación no presencial (según consta en la tabla de adaptación ECTS de primer curso)

Actividad	Horas totales	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11
Estudio de teoría	59	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4
Estudio de problemas	8		1		1		1	1		1	1	
Exámenes incluyendo preparación	34				2	2	2	2	2		4	4