ASIGNATURA DE GRADO:

QUÍMICA HETEROCÍCLICA Y APLICACIONES A LA QUÍMICA FARMACÉUTICA

Curso 2014/2015

(Código:61034148)

1.PRESENTACIÓN DE LA ASIGNATURA

El objetivo de la asignatura Química Heterocíclica y Aplicaciones a la Química Farmacéutica consiste en el estudio de la estructura, comportamiento químico y aplicaciones de los heterociclos o moléculas orgánicas con estructuras cíclicas o anillos que contienen además de átomos de carbono e hidrógeno, heteroátomos entre los que destacan nitrógeno, oxígeno, azufre, boro y fósforo.

La importancia de los heterociclos no deriva sólo de su abundancia, son un 80% de los compuestos orgánicos, sino por formar parte de las estructuras de moléculas de gran relevancia en la vida y en la sociedad: bases púricas o pirimidínicas de los ácidos nucleicos, vitaminas, hormonas, antibióticos, alcaloides, fármacos, herbicidas, colorantes y otros agentes de importancia industrial.

La asignatura consta de 11 temas organizados en dos Unidades Didácticas. En la primera con seis temas se presentan las características generales de los heterociclos aromáticos y no aromáticos, para a continuación estudiar de manera más detallada los de tres, cuatro y cinco eslabones con uno o más heteroátomos, y terminar examinando las betaínas y los compuestos mesoiónicos. En la segunda, de cinco temas, se estudian los heterociclos de seis eslabones con uno o más heteroátomos y sus benzoderivados, y a continuación se analizan los de siete eslabones. En el último tema se revisan y resumen las diferentes reglas de nomenclatura. A medida que se introducen los diferentes sistemas heterociclos, se presentan aquellas propiedades y aplicaciones de mayor interés, en particular en química farmacéutica.

2.CONTEXTUALIZACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIOS

La asignatura Química Heterocíclica y Aplicaciones a la Química Farmacéutica (5 créditos ECTS) es una asignatura optativa que se integra dentro del módulo “Química Aplicada” del plan de estudios del Grado en Químicas. Se imparte en el primer semestre de cuarto curso.

Con el temario de esta asignatura se amplían los contenidos fundamentales de la materia Química Orgánica, haciendo especial hincapié en la importancia de: i) la diferente electronegatividad de los heteroátomos y el carbono que origina enlaces polarizados en la molécula y ii) los pares de electrones no enlazantes que poseen los heteroátomos, para conocer y comprender la química de los heterociclos.

Dicho conocimiento será de gran rentabilidad para el/la Graduado/a en Química en su futuro ejercicio profesional. Así ciertas moléculas utilizadas para combatir la enfermedad de Alzheimer, la cimetidina para el tratamiento de úlceras de estómago, el omeprazol para el reflujo esofágico, el AZT contra el SIDA, el aciclovir para el herpes, los barbitúricos y las benzodiazepinas, o los antisépticos derivados de sales de acridinio o el azul de metileno, no son más que compuestos heterociclos.

La química heterocíclica posee otras muchas aplicaciones en agroquímica y veterinaria, en agentes de abrillantamiento, antioxidantes, fotoprotectores, colorantes y pigmentos.

Un gran número de productos naturales de importancia fundamental para los seres vivos poseen estructuras heterocíclicas, entre los que destacan tres aminoácidos esenciales, histidina, prolina y triptófano, las bases púricas y

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
E8E19A807B318CDEE58CA5B1AEEF940B

pirimidínicas cruciales en el mecanismo de la replicación, la clorofila y el heme derivados del sistema de la porfirina que intervienen en la fotosíntesis y en el transporte de oxígeno en plantas y animales, algunos nutrientes esenciales para la dieta como la tiamina o vitamina B1, la riboflavina o vitamina B2, el piridoxol o vitamina B6, la nicotinamida o vitamina B3 y el ácido ascórbico o vitamina C.

Esta asignatura, desarrolla las competencias genéricas y específicas del título que se detallan a continuación:

Competencias genéricas

- Iniciativa y motivación
- Capacidad de planificación y organización
- Capacidad de análisis y síntesis
- Capacidad para resolver problemas
- Aplicación de los conocimientos a la práctica
- Capacidad de crítica y autocrítica
- Capacidad de aprendizaje autónomo
- Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones
- Comunicación y expresión escrita
- Competencia en el uso de las TIC
- Competencia en la búsqueda de información relevante
- Competencia en la gestión y organización de la información
- Contactar con los problemas reales del químico
- Adquirir conocimientos sobre ámbitos concretos de la química aplicada

Competencias específicas

- Conocer los fundamentos y conceptos de la química de los heterociclos
- Conocer la nomenclatura y terminología específica de la química heterocíclica
- Clasificarlos diferentes tipos de heterociclos: no aromáticos, aromáticos pi-deficientes y aromáticos pi-excedentes
- Aplicar los métodos de síntesis orgánica a la preparación de heterociclos
- Conocer las principales de reacciones que experimentan los heterociclos y los mecanismos de reacción
- Capacidad para relacionar la química heterocíclica con otras disciplinas complementarias
- Reunir e interpretar datos relevantes utilizando la información bibliográfica y técnica para emitir juicios o dictámenes que permitan explicar de manera comprensible fenómenos y procesos relacionados con la química heterocíclica
- Reconocer la importancia de la química heterocíclica en el ámbito científico y sus aplicaciones en química farmacéutica e industrial

3.REQUISITOS PREVIOS REQUERIDOS PARA CURSAR LA ASIGNATURA

Se aconseja, antes de abordar la asignatura optativa de Química Heterocíclica y Aplicaciones a la Química Farmacéutica, haber cursado previamente las asignaturas de la materia de Química Orgánica del Grado en Química.

4.RESULTADOS DE APRENDIZAJE

- Introducir la química heterocíclica como disciplina científica, sus orígenes y su importancia en la vida y en la sociedad
- Conocer la estructura electrónica de los principales tipos de heterociclos y las propiedades que de ella se derivan
- Correlacionar los conocimientos estructurales con la reactividad de los sistemas heterocíclicos fundamentales frente a reactivos de diferente naturaleza
- Aplicar los métodos de síntesis de la química orgánica a la preparación de compuestos heterocíclicos

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
E8E19A807B318CDEE58CA5B1AEEF940B

- Describir las principales aplicaciones de los sistemas heterocíclicos en química farmacéutica y en otros ámbitos
- Ser capaz de formular y nombrar adecuadamente cualquier compuesto heterocíclico aplicando la normativa IUPAC

5.CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

El contenido de esta asignatura se encuentra desarrollado en el texto "QUÍMICA HETEROCÍCLICA", editado por la UNED.

El Programa que se ha organizado en dos Unidades Didácticas y consta de once temas, se muestra a continuación:

PROGRAMA

UNIDAD DIDÁCTICA I

TEMA 1. HETEROCICLOS AROMÁTICOS

INTRODUCCIÓN. ORIENTACIONES GENERALES SOBRE LA NOMENCLATURA DE LOS COMPUESTOS HETEROCÍCLICOS. CLASIFICACIÓN DE LOS HETEROCICLOS. HETEROCICLOS AROMÁTICOS. CRITERIOS DE AROMATICIDAD. TAUTOMERÍA EN COMPUESTOS HETEROAROMÁTICOS.

TEMA 2. HETEROCICLOS NO AROMÁTICOS

INTRODUCCIÓN. TENSIÓN DE ÁNGULO DE ENLACE EN CARBOCICLOS. TENSIÓN DE ÁNGULO DE ENLACE EN HETEROCICLOS. TORSIÓN DE ENLACE. CONFORMACIONES PREFERENTES EN HETEROCICLOS FLEXIBLES. INTERACCIONES DE TIPO ATRACTIVO A TRAVÉS DEL ESPACIO.

TEMA 3. HETEROCICLOS DE TRES Y CUATRO ESLABONES

INTRODUCCIÓN. AZIRIDINAS. 2*H*-AZIRINAS. OXIRANOS. TIIRANOS. DIAZIRIDINAS Y 3*H*-DIAZIRINAS. OXAZIRIDINAS. APLICACIONES DE LOS COMPUESTOS CON ANILLOS DE TRES ESLABONES Y DOS HETEROÁTOMOS. AZETIDINAS. OXETANOS. TIETANOS.

TEMA 4. HETEROCICLOS DE CINCO ESLABONES (I)

INTRODUCCIÓN. PIRROL, FURANO Y TIOFENO: CARACTERÍSTICAS GENERALES. PIRROLES. FURANOS. TIOFENOS. INDOLES. BENZO[b]FURANOS Y BENZO[b]TIOFENOS. HETEROCICLOS BENZO[c]CONDENSADOS.

TEMA 5. HETEROCICLOS DE CINCO ESLABONES (II)

INTRODUCCIÓN. CARACTERÍSTICAS GENERALES DE LOS AZOLES. IMIDAZOLES. PIRAZOLES. TRIAZOLES Y TETRAZOLES. BENZODIAZOLES Y BENZOTRIAZOLES.

TEMA 6. HETEROCICLOS DE CINCO ESLABONES (III)

INTRODUCCIÓN. OXAZOLES, TIAZOLES Y BENZODERIVADOS. ISOXAZOLES, ISOTIAZOLES Y BENZODERIVADOS. OXADIAZOLES Y TIADIAZOLES. BETAÍNAS Y COMPUESTOS MESOIÓNICOS.

UNIDAD DIDÁCTICA II

TEMA 7. HETEROCICLOS DE SEIS ESLABONES (I). PIRIDINAS

INTRODUCCIÓN. PIRIDINAS. DESHIDROPIRIDINAS. REACCIONES DE SUSTITUCIÓN POR RADICALES. REDUCCIÓN DE PIRIDINAS Y SALES DE PIRIDINIO: DIHIDROPIRIDINAS. N-ÓXIDOS, N-IMIDAS Y N-ILUROS DE PIRIDINA. HIDROXI Y AMINOPIRIDINAS. ALQUIL Y ALQUENILPIRIDINAS. ÁCIDOS PIRIDINCARBOXÍLICOS.

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
E8E19A807B318CDEE58CA5B1AEEF940B

TEMA 8. HETEROCICLOS DE SEIS ESLABONES (II). QUINOLINAS E ISOQUINOLINAS. OTRAS PIRIDINAS FUSIONADAS. SALES DE PIRILIO

QUINOLINAS E ISOQUINOLINAS. OTRAS PIRIDINAS FUSIONADAS. SISTEMAS CON OXÍGENO. BENZOPIRANOS.

TEMA 9. HETEROCICLOS DE SEIS ESLABONES (III). DIAZINAS, TRIAZINAS Y TETRAZINAS. SISTEMAS FUSIONADOS. OXAZINAS Y TIAZINAS

INTRODUCCIÓN. REACTIVIDAD GENERAL DE DIAZINAS, TRIAZINAS Y TETRAZINAS. PIRIMIDINAS Y PURINAS. OTRAS DIAZINAS, TRIAZINAS Y TETRAZINAS. SISTEMAS FUSIONADOS. OXAZINAS Y TIAZINAS.

TEMA 10. HETEROCICLOS DE SIETE ESLABONES. AZEPINAS. OXEPINAS Y TIEPINAS. DIAZEPINAS Y BENZODIAZEPINAS

INTRODUCCIÓN. MÉTODOS DE OBTENCIÓN. PROPIEDADES. DIAZEPINAS Y BENZODIAZEPINAS.

TEMA 11. NOMENCLATURA DE HETEROCICLOS

MONOCICLOS. POLICICLOS. FORMA DE NOMBRAR DERIVADOS DE HETEROCICLOS. REPRESENTACIÓN DEL ESTADO DE HIDROGENACIÓN EN DETERMINADOS HETEROCICLOS. RESUMEN.

6.EQUIPO DOCENTE

- ROSA M CLARAMUNT VALLESPI

7.METODOLOGÍA Y ACTIVIDADES DE APRENDIZAJE

Se utilizará la metodología de la UNED, basada fundamentalmente en una enseñanza a distancia de carácter virtual. El estudiantado dispondrá de la plataforma de e-Learning, aLF, para el aprendizaje y la colaboración a través de internet. Esta plataforma proporcionará el adecuado interfaz de interacción entre estudiante, Equipo Docente y Tutor/a.

El material para el estudio de los contenidos teóricos se encuentra recogido en el texto que se indica en el apartado de bibliografía básica. No obstante, tendrá a su disposición, a través del curso virtual, una serie de documentos que le servirán como material complementario. También por medio del curso virtual el Equipo Docente indicará la realización de distintas actividades.

El aprendizaje de esta asignatura conlleva una serie de actividades que se pueden distribuir en dos grupos:

- Actividades relativas al trabajo autónomo
- Actividades relativas a la interacción del estudiantado en entornos virtuales

Esta asignatura tiene asociados 5 créditos ECTS que equivalen a 125 horas de trabajo de cada estudiante. En la Guía de estudio parte II (disponible en el curso virtual) se propone un cronograma de distribución actividades/ horas/ECTS.

8.EVALUACIÓN

Se podrá optar por dos modalidades de evaluación:

- Evaluación única de la PRUEBA PRESENCIAL (PP).
- Evaluación continua. Consistirá en la evaluación tanto de la PRUEBA PRESENCIAL (PP) como de dos PRUEBAS DE EVALUACIÓN CONTINUA (PEC) realizadas a lo largo del curso.

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
E8E19A807B318CDEE58CA5B1AEEF940B

PRUEBA PRESENCIAL (PP) (de carácter obligatorio)

Al ser una asignatura a cursar durante el primer semestre habrá una Prueba Presencial en la convocatoria de febrero y para los que no la superen o no se hayan presentado hay otra, en la convocatoria de septiembre. La duración de la prueba o examen será de dos horas y para su realización no se permite el uso de ningún material.

La prueba o examen constará de cuatro o cinco preguntas, que versarán sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura. Esta prueba se realiza en los Centros Asociados en el horario indicado en el calendario de pruebas presenciales elaborado por la UNED.

PRUEBAS DE EVALUACIÓN CONTINUA CALIFICATIVAS (PEC) (de carácter voluntario)

La evaluación continua consistirá en la resolución de dos pruebas de evaluación continua (PEC) que se entregarán a través del curso virtual mediante la herramienta de "tareas" en una fecha determinada que se indicará en el curso virtual.

La PEC-1 consistirá en la resolución de un conjunto de ejercicios y problemas relacionados con los temas 1-6, mientras que la PEC-2 tratará sobre los temas 7-11.

La contribución de las Pruebas de Evaluación Continua a la calificación final será de hasta 1 puntos (0,5 punto por PEC), siempre y cuando sean entregadas en las fechas indicadas, siendo necesario obtener una calificación igual o superior a 4 puntos en la Prueba Presencial.

9.BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Comentarios y anexos:

Título: Química Heterocíclica

Autoras: CONCEPCIÓN BARTHÉLEMY GONZÁLEZ, Mª DEL PILAR CORNAGO RAMÍREZ y SOLEDAD ESTEBAN SANTOS.

Editorial: UNED, 2014

El texto base recomendado es autosuficiente. La estructura de los temas es similar, constan de los objetivos (general y específicos) que se pretenden conseguir, el desarrollo del propio tema, la lista de heterociclos nombrados y los ejercicios de autocomprobación con sus soluciones, con el fin de que el/la estudiante pueda evaluarse al finalizar el estudio de cada tema.

10.BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Comentarios y anexos:

El texto base editado por la UNED, que se indica en la Bibliografía básica es autosuficiente, pero si se desea consultar bibliografía complementaria el equipo docente recomienda los siguientes textos:

- ALVAREZ-BUILLA, J.; VAQUERO. J. J.; BARLUENGA, J. (Editores): Modern Heterocyclic Chemistry, Vols. I-II. Wiley-VCH. Weinheim, 2011. ISBN: 978-3-527-33201-4.
- EICHER, T.; HAUPTMANN, S; SPEICHER, A..: The Chemistry of Heterocycles. 3a ed. Wiley-VCH. Weinheim, 2012. ISBN: 978-3-527-32747-8.
- GUPTA, R. R.; KUMAR, M.; GUPTA, V.: Heterocyclic Chemistry, Vols. I–III; Springer. Berlin, 1998. ISBN: 978-3-642-72278-3.
- GILCHRIST, T. L.: Química Heterocíclica. Addison-Wesley Iberoamerica. Madrid,1995. ISBN: 0-201-62587-3.
- JIE-JACK LI (Editor).: Name Reactions in Heterocyclic Chemistry. Wiley-Interscience. New Jersey, 2005. ISBN: 0-471-30215-5.

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
E8E19A807B318CDEE58CA5B1AEEF940B

- JOULE, J. A.; MILLS, K.: Heterocyclic Chemistry. 5a ed. Oxford. 2010. ISBN: 978-1-405-19365-8.
- JOULE, J. A.; MILLS, K.: Heterocyclic Chemistry at a Glance. 2a ed. Oxford. 2013. ISBN: 978-0-470-97122-2.
- KATRITZKY, A. R.; RAMSDEN, C. A.; JOULE; J. A. ZHDANKIN; V.V.: Handbook of Heterocyclic Chemistry 3ª ed. Elsevier. Nueva York, 2010. ISBN-13: 978-0-08-095843-9.
- KATRITZKY, A. R.; RAMSDEN, C. A.; SCRIVEN, E. F. V.; TAYLOR, R. J. K. (Editores): Comprehensive Heterocyclic Chemistry III. Elsevier. Nueva York, 2008. ISBN: 978-0-08-044992-0.
- MILCENT, R.: Chimie Organique Hétérocyclique. EDP Sciences. 2002. ISBN: 2-86883-583-X.
- NEWKOME, G. R.; PAUDLER, W. W.: Contemporary Heterocyclic Chemistry. Wiley. New Jersey, 1982. ISBN-13: 978-0-471-06279-0.
- PAQUETTE, L. A.: Fundamentos de Química Heterocíclica. Ed. Limusa. México, 1987. ISBN: 968-18-1833-4.
- POZHARSKII, A. F.; SOLDANTEKOV, A. T.; KATRITZKY, A. R.: Heterocycles in Life and Society. 2ª ed. Wiley. New Jersey, 2011. ISBN: 0-471-96034-9
- QUINN, I. D.; TYRELL, J. A.: Fundamentals of Heterocyclic Chemistry. Wiley. New Jersey, 2010. ISBN: 978-0-470-5669-5.
- YOUNG, D. W.: Química de los Heterociclos. Ed. Alhambra. Madrid, 1981. ISBN: 8420503835.

11.RECURSOS DE APOYO

Curso Virtual

El curso virtual de esta asignatura, disponible en la plataforma aLF, será la principal herramienta de comunicación entre profesorado (Equipo Docente y Profesorado Tutor/a) y estudiantes a través de los distintos foros. Constituye un recurso de apoyo fundamental y su uso es imprescindible.

Además, en dicho curso v irtual se podrán encontrar recursos didácticos complementarios para el estudio de la asignatura y el Equipo Docente informará a sus estudiantes de los cambios y/o novedades que vayan surgiendo.

Tutorias Presenciales

Si en su Centro Asociado se llevan a cabo tutorias presenciales es muy conveniente que asistan, ya que el Tutor/a de la asignatura en dicho CA le orientará en el estudio y en la resolución de dudas.

Biblioteca

Podrán disponer de los fondos bibliográficos de las bibliotecas de la UNED, tanto de la Sede Central como de los Centros Asociados. A través de la web de la Biblioteca de la UNED, podrá hacer uso de los recursos *online*.

12.TUTORIZACIÓN

Ante cualquier tipo de duda que les pueda surgir, de contenidos o de funcionamiento general de la asignatura, pueden ponerse en contacto con el Equipo Docente a través de las herramientas de comunicación incluidas en el Curso Virtual, ya sea a través del correo para consultas privadas o bien a través de los Foros para consultas públicas.

También se podrá contactar con el Equipo Docente por vía telefónica en el horario de guardia de la asignatura, excepto períodos de vacaciones y semanas de celebración de las Pruebas Presenciales.

Profesora: Rosa Mª Claramunt Vallespí

Horario: Martes de 15 a 19 horas

Teléfono: 91 398 7322

Correo electrónico: rclaramunt@ccia.uned.es

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
E8E19A07B318CDEE58CA5B1AEEF940B