

# COMPUESTOS HETEROCICLICOS Y ANÁLISIS ESTRUCTURAL

## 1.- INFORMACIÓN GENERAL

1.1	Asignatura	Compuestos Heterocíclicos y Análisis Estructural
1.2	Departamento	Química Orgánica y Físicoquímica
1.3	Carrera	Química y Farmacia
1.4	Carácter	Obligatorio
1.5	Régimen	Semestral
1.6	Requisitos	Química Orgánica II
1.7	Duración	15 Semanas lectivas
1.7.1		45 Horas totales
1.7.2		30 Horas teóricas
1.7.3		15 Horas seminarios
1.7.4		4 Créditos
1.10		Quinto Semestre

## 2.- INTRODUCCIÓN

### 2.1 PROPÓSITOS

Integrar los conocimientos básicos adquiridos en las Asignaturas previas de Química Orgánica para aplicarlos en el estudio de las reacciones y las propiedades físicas y químicas de las principales moléculas heterocíclicas que constituyen la base de la mayoría de los medicamentos.

### 2.2 DESCRIPCIÓN DE LA ASIGNATURA

En esta Asignatura se desarrollará el estudio de los compuestos heterocíclicos fundamentalmente en lo referente a su nomenclatura, reactividad, interés farmacológico y análisis estructural. El objetivo principal de la Asignatura es el de relacionar sus propiedades y estructuras con aspectos de interés farmacéutico tales como acción terapéutica, estabilidad de medicamentos y además, se estudiarán las técnicas de análisis más utilizadas actualmente.

## 3.- OBJETIVOS EDUCACIONALES

### 3.1 OBJETIVOS GENERALES

Esta Asignatura de carácter teórico se ha diseñado para que el estudiante adquiera conocimientos generales de los compuestos heterocíclicos y de los principales análisis de sus estructuras más importantes.

### 3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

#### 3.2.1 OBJETIVOS ESPECÍFICOS DE CONOCIMIENTO

Integrar los conocimientos básicos de Química Orgánica adquiridos previamente y aplicarlos en el estudio de los compuestos heterocíclicos

#### 3.2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS DE HABILIDADES

Cómo la gran mayoría de los medicamentos están compuestos principalmente por derivados heterocíclicos, es importante aplicar los conocimientos adquiridos para relacionar las propiedades de ellos con la resolución adecuada de los diversos problemas que puedan presentarse.

#### 3.2.3 OBJETIVOS ESPECÍFICOS DE ACTITUDES

Lograr que el estudiante adquiera una visión global de las diferentes propiedades de un medicamento por el análisis riguroso de la estructura del heterocíclico presente.

#### 4.- CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

##### Capítulo 1.- Análisis espectroscópico.

- I) Bases espectroscópicas de  $^1\text{H}$ -RMN y  $^{13}\text{C}$ -RMN. Aplicaciones.
- II) Espectroscopia UV e IR. Identificación de drogas y compuestos afines. Reconocimiento diferencial de funciones en compuestos poli funcionales.
- III) Espectrometría de masas. Fragmentaciones. Aplicaciones.

##### Capítulo 2.- Nomenclatura de los compuestos heterocíclicos.

Reglas de nomenclatura en sistemas mono y poli cíclicos.

##### Capítulo 3.- Estructuras y propiedades.

- I) Por qué la Naturaleza prefiere los heterocíclicos. Propiedades fisicoquímicas: solubilidad, puentes de hidrógeno, interacciones electrostáticas, complejos moleculares, fuerzas hidrofóbicas, etc.
- II) Reacciones generales.
  - a).Acidez y basicidad en heterocíclicos. Concepto de pKa.
  - b) Interacción con metales.
- III) Tautomería.

##### Capítulo 4.- Fundamentos de reactividad.

Reacciones de sustitución electrofílica y nucleofílica en anillos de 4, 5 y 6 miembros.  
Aromaticidad.  
Generalidades sobre estabilidad y biotransformaciones.

- 5.- **PROFESORES PARTICIPANTES:** Dra. Carolina Jullian M (**COORDINADOR**)  
Dr. Hernan Pessoa M.

#### 6.- METODOLOGÍA

La Asignatura se desarrollará en 15 semanas lectivas con 2 clases teóricas semanales (Miércoles 10:20 – 12:00 horas, Sala O2) y 1 hora de seminario (Martes o Miércoles 12:20 – 13:00 horas; Salas O13 y O2 respectivamente)

##### EVALUACIONES:

Los alumnos deberán rendir **dos** pruebas de este tipo (A1 y A2). Estas pruebas son **acumulativas** y comprenderán la materia tratada en clases hasta la semana anterior a la prueba. Las respuestas deberán ser **breves**, ordenadas y con letra clara, escribiendo todo lo correspondiente a una pregunta en forma continuada. **La interpretación de las preguntas** es parte de la prueba; por lo tanto solo se admitirán consultas **sobre la redacción de las preguntas**, durante los primeros 30 minutos de su desarrollo.

Las dos pruebas referidas anteriormente, tienen el mismo coeficiente de ponderación: 0,5

La inasistencia a alguna de estas pruebas (**sólo a una de ellas**), permite su recuperación en la prueba **PRE** la que será **acumulativa y única** y su coeficiente corresponderá al de la prueba que el alumno esté recuperando.

**La inasistencia a las dos pruebas “A”, con o sin justificación, es causal de reprobación de la asignatura, por considerarse que el estudiante ha estado ajeno al desarrollo del curso.**

Si el promedio de A1 + A2. (P1) es 5,0 o superior, el alumno puede optar por la eximición en la Asignatura.

Si (P1) es inferior a 5,0, el alumno podrá rendir una prueba recuperativa (**PRE**), la que se rinde en una fecha fijada por la Secretaría de Estudios, una vez terminadas las clases. Su ponderación estadística corresponderá a la prueba que se esté recuperando.

La prueba PRE es voluntaria y debe:

- a) ser única, con todos los contenidos del curso
- b) sustituir la nota más baja de **sólo una prueba A**. Su reemplazo es **obligatorio**; por consiguiente el promedio puede aumentar o disminuir.
- c) corresponder a la prueba de quién haya estado ausente sólo en una prueba A.

Si después de haber rendido la **PRE**, el nuevo promedio es igual o superior a 4,0 y además la nota de la prueba es 4,0 o superior, el estudiante quedará aprobado(a) con una evaluación correspondiente a P2.

Si la nota de la **PRE** es inferior a 4,0 el estudiante deberá rendir examen, aunque el promedio de sus evaluaciones esté por sobre un 4.0 En este caso, la nota final del curso se calculará asignando un 60% al promedio anterior y un 40% al examen.

Este examen también podrán rendirlo aquellos estudiantes que hayan estado ausentes en la prueba recuperativa (**PRE**).

## 7.- BIBLIOGRAFÍA.-

- 1.- T. L- Gilchrist. "Heterocyclic Chemistry", Longman S. Technical. Third edition, **1997**.
- 2.- J. A. Joule, K. Mills. "Heterocyclic Chemistry", Fourth Edition. Blackwell Science, **2000**.
3. - A. F. Pozharskii; A.R. Katritzky. "Handbook of Heterocyclic Chemistry. Pergamon Edit. Second Edition, **2000**.
4. - T. Eicher, S. Hauptman, "The Chemistry of Heterocycles " First Edition Edit. Thieme Publishing, **1995**.
5. - A.F. Pozharskii, A.T. Soldatenkov, A.R. Katritzky. "Heterocycles in Life and Society". John Wiley. Edit. First Edition. **1997**.
6. - F. Carey. "Química Orgánica". Mc. Graw Hill, Tercera Edición, **1999**.
7. - T. W. G. Solomons. "Organic Chemistry" Limusa México. **1999**.
8. - F.R.J. Fessenden , "Organic Chemistry". Fifth Edition, **1994**.
9. - R. M. Silverstein, G. C. Bassler, T. C. Morrill. "Spectrophotometric Identification of Organic Compounds". Sixth Edition, **1998**.
- 10.- Reglas de nomenclatura en compuestos heterocíclicos. *Journal of the American Chemical Society (J. Am. Chem. Soc.)*, Nov. 5, pag. 5566, **1960**.
- 11.- Publicaciones Periódicas de Consulta : Heterocycles ; Journal of Heterocyclic Chemistry; Journal of Medicinal Chemistry; Heterocyclic Communications ; Bioorganic and Medicinal Chemistry ; Tetrahedron, Current of Medicinal Chemistry etc.

## 8.- RESUMEN DE ACTIVIDADES

COMPUESTOS HETEROCÍCLICOS Y ANÁLISIS ESTRUCTURAL				
	CLASES		SEMINARIOS	
	Lunes 10:20 -12:00 (Sala 03)		Lunes/Martes (Sala 05 / 05)	
SEMANA	FECHA	MATERIA	FECHAS	MATERIAS
1	9 Abril	<sup>1</sup> H-RMN		No hay
2	16 Abril	<sup>1</sup> H-RMN		<sup>1</sup> H-RMN
3	23 Abril	Masas		<sup>1</sup> H-RMN
4	30 Abril	IR		<sup>1</sup> H-RMN
5	7 Mayo	Nomenclatura		Masas
6	14 Mayo	Nomenclatura		UV/ IR
7	21 Mayo			Nomenclatura
8	28 Mayo	Estructura y propiedades		Nomenclatura
9	4 Junio	Estructura y propiedades		Estructura y propiedades
10	11 Junio	Estabilidad		Estructura y propiedades
11	18 Junio	Estabilidad		Estabilidad
12	25 Junio	Reactividad		Estabilidad
13	2 Julio			Estabilidad
14	9 Julio	Reactividad		Reactividad
15	16 Julio			Reactividad