



| Guía Docente          |   |                    |   |          |
|-----------------------|---|--------------------|---|----------|
| Datos Identificativos |   |                    |   | 2012/13  |
| Asignatura (*)        | Análise Estructural e Planificación Sintética   | Código             | 610500003   |          |
| Titulación            | Mestrado Universitario en Ciencias. Tecnoloxías e Xestión Ambiental (plan 2012)   |                    |   |          |
| Descritores           |   |                    |   |          |
| Ciclo                 | Período   | Curso              | Tipo  | Créditos |
| Mestrado Oficial      | 1º cuatrimestre   | Primeiro           | Optativa  | 6        |
| Idioma                |   |                    |   |          |
| Prerrequisitos        |   |                    |   |          |
| Departamento          | Química Fundamental   |                    |   |          |
| Coordinación          | Rodríguez Gonzalez, Jaime   | Correo electrónico | jaime.rodriguez@udc.es  |          |
| Profesorado           | Maestro Saavedra, Miguel Anxo<br>Quintela Lopez, Jose María<br>Rodríguez Gonzalez, Jaime  | Correo electrónico | miguel.maestro@udc.es<br>jose.maria.quintela@udc.es<br>jaime.rodriguez@udc.es |          |
| Web                   | campusvirtual.udc.es  |                    |   |          |
| Descrición xeral      | A materia está dirixida a ampliar os coñecementos dos Licenciados/Graduados en Química tanto en Determinación Estrutural como en síntese orgánica. Nun primeiro bloque introdúcense aplicacións da espectrometría de masas en Química Orgánica e as técnicas bidimensionais en RMN. Nun segundo bloque estúdiase as estratexias en síntese orgánica e síntese asimétrica, así como as novas metodoloxías. |                    |   |          |

| Competencias da titulación |  |
|----------------------------|--|
| Código                     | Competencias da titulación   |
| A2                         | Deseño de novas especies químicas e materiais con propiedades determinadas.  |
| A3                         | Capacitar ao alumno para o desenvolvemento dun traballo de investigación nun campo da Química ou do Medio Ambiente, incluíndo os procesos de caracterización de materiais, o estudo das súas propiedades fisicoquímicas e biolóxicas e dos procesos que poden sufrir no medio natural. |
| A5                         | Capacitación para o deseño de vías de síntese e retrosíntese de novos compostos.   |
| A22                        | Dominar as técnicas instrumentais de análises máis típicas no ámbito químico profesional.  |
| B4                         | Que os estudantes saiban comunicar as súas conclusións e os coñecementos e razóns últimas que as sustentan a públicos especializados e non especializados dun modo claro e sen ambigüedades.   |
| B7                         | Ser capaz de planificar adecuadamente desenvolvementos experimentais, a un nivel especializado.  |
| C1                         | Ser capaz de traballar en equipos, especialmente nos interdisciplinares e internacionais.  |
| C3                         | Ser capaz de adaptarse a situacións novas, mostrando creatividade, iniciativa, espírito emprendedor e capacidade de liderado.  |
| C4                         | Expresarse correctamente, tanto de forma oral coma escrita, nas linguas oficiais da comunidade autónoma.   |
| C6                         | Utilizar as ferramentas básicas das tecnoloxías da información e as comunicacións (TIC) necesarias para o exercicio da súa profesión e para a aprendizaxe ao longo da súa vida.  |
| C11                        | Valorar a importancia que ten a investigación, a innovación e o desenvolvemento tecnolóxico no avance socioeconómico e cultural da sociedade.  |

| Resultados da aprendizaxe   |      |                            |      |
|---|------|----------------------------|------|
| Competencias de materia (Resultados de aprendizaxe)   |      | Competencias da titulación |      |
| Coñecemento das técnicas de RMN bidimensionais e as estratexias para a planificación dunha síntese orgánica | AM2  | BM4                        | CM1  |
|   | AM3  | BM7                        | CM3  |
|   | AM5  |                            | CM4  |
|   | AM22 |                            | CM6  |
|   |      |                            | CM11 |

| Contidos |          |
|----------|----------|
| Temas    | Subtemas |
|          |          |



|  |  |
|--|--|
| Tema 1: Espectrometría de masas.                                   | Métodos de ionización: CI, FAB, APCI, ESI y MALDI. Aplicaciones para la obtención de la fórmula molecular de un compuesto. Espectrometría de masas de biomoléculas: proteínas y ácidos nucleicos. Espectrometría de masas en tándem (MS/MS).   |
| Tema 2: Técnicas de RMN multidimensionales.                        | El desplazamiento químico y acoplamiento espín-espín. La relajación en RMN: NOE, nOediff. La transferencia de polarización: experimentos INEPT, DEPT y APT. Espectroscopia RMN bidimensional, conceptos básicos. Experimentos COSY, HETCOR, NOESY, ROESY e INADEQUATE. Espectroscopia inversa: HMQC vs. HSQC. HMBC. Métodos de J-resuelta: JHH; JCH. Medidas de constantes de acoplamiento a larga distancia, LR-COSY y J-HMBC. Experimentos más complejos: 1H-1H TOCSY (HOHAHA), HSQC-TOCSY, HSQC-NOESY y HETLOC. |
| Tema 3. Análisis Estructural Orgánico                              | Estrategias para la resolución de problemas combinados.  |
| Tema 4. Síntesis asimétrica  | Introducción. Principios básicos. Resolución cinética. Síntesis estereoselectivas: auxiliares quirales. Procesos catalíticos.  |
| Tema 5. Planificación y estrategias en síntesis orgánica.          | Análisis retrosintético. Selectividad en síntesis orgánica. Grupos protectores en síntesis orgánica.   |
| Tema 6. Reacciones de reducción.                                   | Reducción de alquenos: Hidrogenación asimétrica. Reacciones de hidrobtoración. Reacciones de hidroformilación. Reducción de cetonas e iminas. Reacciones de hidrogenación. Reacciones con oxazaborolidinas. Reacciones de hidrosililación.   |
| Tema 7. Reacciones de oxidación.                                   | Epoxidación de alquenos. Epoxidación de alcoholes alílicos. Epoxidación con sales de manganeso (salen). Formación de azirinas. Dihidroxiación de alquenos. Aminohidroxiación de alquenos. Oxidación de Baeyer-Villiger y relacionadas  |
| Tema 8. Reacciones de adición nucleófila a compuestos carbonílicos | Adición de organometálicos de zinc. Adición de ion cianuro. Alilación de aldehídos. La reacción aldólica. Reacciones de adición a iminas. Reacción de Baylis-Hillman. Reacciones de adición conjugada.   |

## Planificación

| Metodoloxías / probas    | Horas presenciais | Horas non presenciais /<br>traballo autónomo | Horas totais |
|--------------------------|-------------------|--|--------------|
| Sesión maxistral         | 20                | 40   | 60           |
| Prácticas de laboratorio | 10                | 14.9   | 24.9         |
| Traballos tutelados      | 2                 | 8  | 10           |
| Proba obxectiva          | 2                 | 8  | 10           |
| Presentación oral        | 1                 | 4  | 5            |
| Aprendizaxe colaborativa | 9.5               | 26.6   | 36.1         |
| Actividades iniciais     | 0.5               | 0.5  | 1            |
| Atención personalizada   | 3                 | 0  | 3            |

\*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado

## Metodoloxías

| Metodoloxías             | Descrición   |
|--------------------------|--|
| Sesión maxistral         | Desarrollo de los contenidos fundamentales del programa mediante explicaciones teóricas y ejemplos prácticos.  |
| Prácticas de laboratorio | Análisis y resolución de los problemas seleccionados por el profesor. Elucidación estructural de compuestos desconocidos mediante análisis e integración de datos de RMN y masas.<br>Se proponen sesiones de laboratorio que se centrarán en el uso de nuevas metodoloxías en Síntesis Orgánica: Microondas, síntesis en fase sólida, ultrasonidos, etc. |
| Traballos tutelados      | Elaboración de un informe sobre la predicción y/o interpretación de la reactividad de compuestos orgánicos con especial atención a la utilización de metodoloxías computacionales  |



|                          |  |
|--------------------------|--|
| Proba obxectiva          | Se programa un examen escrito, con o fin de avaliar o grado de asimilación e a capacidade de aplicación dos contidos da materia por parte do alumnado. |
| Presentación oral        | Exposición do traballo tutelado, con apoio de novas tecnoloxías.   |
| Aprendizaxe colaborativa | Preparación das clases de exposición, resolución de exercicios en grupos y/o individualizados.   |
| Actividades iniciais     | Presentación do curso e a súa programación de contidos, actividades e criterios de avaliación  |

### Atención personalizada

| Metodoloxías   | Descrición   |
|--|--|
| Prácticas de laboratorio<br>Aprendizaxe colaborativa | Seguimento e orientación durante a elaboración do informe sobre estratexias sintéticas e de análise estrutural, en sesións individuais no horario de tutorías do profesor. |

### Avaliación

| Metodoloxías             | Descrición  | Cualificación |
|--------------------------|---|---------------|
| Prácticas de laboratorio | Evaluación continua do traballo no laboratorio onde se terá en conta o interese e a actitude do alumno, a destreza alcanzada na utilización das ferramentas sintéticas, así como a resolución de problemas de elucidación estrutural mediante o análise de datos espectroscópicos | 50            |
| Traballos tutelados      | Se valorará a elaboración dun traballo de revisión bibliográfica e a súa redacción de maneira concisa e rigurosa, empregando a terminoloxía adecuada, sobre alguno dos contidos presentados nas sesións magistrais  | 10            |
| Presentación oral        | Evaluación das exposicións orais correspondentes ao traballo de revisión bibliográfica e as solucións dos problemas de elucidación estrutural   | 10            |
| Proba obxectiva          | Resolución de problemas de Síntese Orgánica e de Determinación Estructural  | 30            |

### Observacións avaliación

Es necesario obter alcanzar un 50% para aprobar a asignatura.  
Para que unha metodoloxía sexa contabilizada debe superarse ao menos o 40% da nota.

### Fontes de información

|                                    |   |
|------------------------------------|---|
| <b>Bibliografía básica</b>         | <ul style="list-style-type: none"><li>- E. N. Jacobsen, A. Pfaltz, H. Yamamoto (1999). Comprehensive Asymmetric Catalysis. Berlin, Springer</li><li>- Crews, P, Rodríguez, J., Jaspers, M. (2009). Organic Structure Analysis. 2nd Ed. Osford University Press; New York</li><li>- Smith, M. B (2002). Organic Synthesis. Boston, McGraw-Hill</li><li>- Gewert J. A.; Görlitzer, J.; Götze, S.; Looft, J.; Menningen, P.; Nöbel, T.; Schirock, H.; Wulff, C. (2000). Organic Synthesis Workbook. Weinheim, Wiley</li><li>- Bittner, C.; Busemann, A. S.; Griesbach, U.; Hauer, F.; Krahnert, W.-R.; Modi, A.; Olschmke, J. (2000). Organic Synthesis Workbook II. Weinheim, Wiley</li><li>- Tom Kinzel... [et al.] (2007). Organic synthesis workbook III. Weinheim, Wiley</li><li>- Wyatt, P.; Warren, S. (2007). Organic Synthesis: Strategy and Control.. England, Wiley</li></ul> |
| <b>Bibliografía complementaria</b> | <ul style="list-style-type: none"><li>- Hesse, M. (1995). Métodos Espectroscópicos en Química Orgánica. Madrid, Síntesis</li><li>- Eliel, E. L. (1994). Stereochemistry of Organic Compounds. New York, Wiley</li></ul>   |

### Recomendacións

**Materias que se recomenda ter cursado previamente**

**Materias que se recomenda cursar simultaneamente**

**Materias que continúan o temario**



|              |
|--------------|
|              |
| Observacións |
|              |

(\*)A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías