



Guía Docente				
Datos Identificativos				2014/15
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	Quintela Lopez, Jose Maria	Correo electrónico	jose.maria.quintela@udc.es	
Profesorado	Maestro Saavedra, Miguel Anxo Quintela Lopez, Jose Maria	Correo electrónico	miguel.maestro@udc.es jose.maria.quintela@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 / 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. 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 de los contenidos de la materia por parte del alumnado.
Presentación oral	Exposición del trabajo tutelado, con apoyo de nuevas tecnologías.
Aprendizaxe colaborativa	Preparación de las clases de exposición, resolución de ejercicios en grupos y/o individualizados.
Actividades iniciais	Presentación del curso y su programación de contenidos, actividades y criterios de evaluación

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Prácticas de laboratorio Aprendizaxe colaborativa	Seguimiento y orientación durante la elaboración del informe sobre estrategias sintéticas y de análisis estructural, en sesiones individuales en el horario de tutorías del profesor.

Avaliación

Metodoloxías	Descrición	Cualificación
Prácticas de laboratorio	Evaluación continua del trabajo en el laboratorio en donde se tendrá en cuenta el interés y la actitud del alumno, la destreza alcanzada en la utilización de las herramientas sintéticas, así como el la resolución de problemas de elucidación estructural mediante el análisis de datos espectroscópicos	50
Traballos tutelados	Se valorará la elaboración de un trabajo de revisión bibliográfica y su redacción de manera concisa y rigurosa, empleando la terminología adecuada, sobre alguno de los contenidos presentados en las sesiones magistrales	10
Presentación oral	Evaluación de las exposiciones orales correspondientes al trabajo de revisión bibliográfica y las soluciones de los problemas de elucidación estructural	10
Proba obxectiva	Resolución de problemas de Síntesis Orgánica y de Determinación Estructural	30

Observacións avaliación

Es necesario obtener alcanzar un 50% para aprobar la asignatura.

Para que una metodología sea contabilizada debe superarse al menos el 40% de la nota.

Fontes de información

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

Recomendacións

Materias que se recomienda ter cursado previamente

Materias que se recomienda 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