



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 AM3 AM5 AM22	BM4 BM7	CM1 CM3 CM4 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 hidrobioración. 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 aziridinas. 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 computacionais



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 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 na 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

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.; Olschmke, 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 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