



Teaching Guide				
Identifying Data				2016/17
Subject (*)	Análise Estructural e Planificación Sintética		Code	610500003
Study programme	Mestrado Universitario en Ciencias. Tecnoloxías e Xestión Ambiental (plan 2012)			
Descriptors				
Cycle	Period	Year	Type	Credits
Official Master's Degree	1st four-month period	First	Optativa	6
Language	Spanish			
Teaching method	Face-to-face			
Prerequisites				
Department	Química Fundamental			
Coordinador	Maestro Saavedra, Miguel Anxo	E-mail	miguel.maestro@udc.es	
Lecturers	Maestro Saavedra, Miguel Anxo Quintela Lopez, Jose Maria	E-mail	miguel.maestro@udc.es jose.maria.quintela@udc.es	
Web	campusvirtual.udc.es			
General description	A materia está dirixida a ampliar os coñecementos dos Licenciados/Graduados en Química tanto en Determinación Estructural 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 estúdiáanse as estratexias en síntese orgánica e síntese asimétrica, así como as novas metodoloxías.			

Study programme competences	
Code	Study programme competences
A1	Coñecemento das realidades interdisciplinares da Química e do Medio Ambiente, dos temas punteiros nestas disciplinas e das perspectivas de futuro.
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.
A4	Coñecer en profundidade as características e fundamentos de diversos modelos químicos para o estudo de sistemas orgánicos, inorgánicos e biolóxicos, incluídos os materiais con proxección tecnolóxica.
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.
B1	Posuír e comprender coñecementos que acheguen unha base ou oportunidade de ser orixinais no desenvolvemento e/ou aplicación de ideas, a miúdo nun contexto de investigación.
B2	Que os estudantes saiban aplicar os coñecementos adquiridos e a súa capacidade de resolución de problemas en contornas novas ou pouco coñecidas dentro de contextos máis amplos (ou multidisciplinares) relacionados coa súa área de estudo.
B3	Que os estudantes sexan capaces de integrar coñecementos e enfrontarse á complexidade de formular xuízos a partir dunha información que, sendo incompleta ou limitada, inclúa reflexións sobre as responsabilidades sociais e éticas vinculadas á aplicación dos seus coñecementos e xuízos.
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.
B5	Que os estudantes posúan as habilidades de aprendizaxe que lles permitan continuar estudando dun modo que haberá de ser en gran medida autodirixido ou autónomo.
B6	Ser capaz de analizar datos e situacións, xestionar a información dispoñible e sintetizala, todo iso a un nivel especializado.
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.
C5	Dominar a expresión e a comprensión de forma oral e escrita dun idioma estranxeiro.



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.
C9	Valorar criticamente o coñecemento, a tecnoloxía e a información dispoñible para resolver os problemas cos que deben afrontarse.
C11	Valorar a importancia que ten a investigación, a innovación e o desenvolvemento tecnolóxico no avance socioeconómico e cultural da sociedade.

Learning outcomes			
Learning outcomes	Study programme competences		
Coñecemento das técnicas de RMN bidimensionais e as estratexias para a planificación dunha síntesis orgánica	AC1	BC1	CC1
	AC2	BC2	CC3
	AC3	BC3	CC4
	AC4	BC4	CC5
	AC5	BC5	CC6
	AC22	BC6	CC9
		BC7	CC11

Contents	
Topic	Sub-topic
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 hidroboração. 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 azidirinas. Dihidroxilación de alquenos. Aminohidroxilación 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.

Planning				
Methodologies / tests	Competencies	Ordinary class hours	Student?s personal work hours	Total hours



Guest lecture / keynote speech	A1 A2 A3 A4 A5 B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7 C3 C1 C9 C11	20	40	60
Laboratory practice	A5 A22 B1 B2 B5 B6 B7 C3 C1 C4 C6	10	14.9	24.9
Supervised projects	A5 B1 B2 B3 B4 B5 B6 C3 C1 C4 C5 C6 C9	2	8	10
Objective test	A1 A2 A3 A5 A22 B1 B2 B3 B4 B6 C3 C1 C4 C5	2	8	10
Oral presentation	B4 B5 C4 C5 C6 C9 C11	1	4	5
Collaborative learning	B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7 C3 C1	9.5	26.6	36.1
Introductory activities	A1 A2 A3 C9 C11	0.5	0.5	1
Personalized attention		3	0	3

(*)The information in the planning table is for guidance only and does not take into account the heterogeneity of the students.

Methodologies	
Methodologies	Description
Guest lecture / keynote speech	Desarrollo de los contenidos fundamentales del programa mediante explicaciones teóricas y ejemplos prácticos.
Laboratory practice	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 metodologías en Síntesis Orgánica: Microondas, síntesis en fase sólida, ultrasonidos, etc.
Supervised projects	Elaboración de un informe sobre la predicción y/o interpretación de la reactividad de compuestos orgánicos con especial atención a la utilización de metodologías computacionales
Objective test	Se programa un examen escrito, con el fin de evaluar el grado de asimilación y la capacidad de aplicación de los contenidos de la materia por parte del alumnado.
Oral presentation	Exposición del trabajo tutelado, con apoyo de nuevas tecnologías.
Collaborative learning	Preparación de las clases de exposición, resolución de ejercicios en grupos y/o individualizados.
Introductory activities	Presentación del curso y su programación de contenidos, actividades y criterios de evaluación

Personalized attention	
Methodologies	Description
Laboratory practice Collaborative learning	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.

Assessment			
Methodologies	Competencies	Description	Qualification
Laboratory practice	A5 A22 B1 B2 B5 B6 B7 C3 C1 C4 C6	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
Supervised projects	A5 B1 B2 B3 B4 B5 B6 C3 C1 C4 C5 C6 C9	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



Oral presentation	B4 B5 C4 C5 C6 C9 C11	Evaluación de las exposiciones orales correspondientes al trabajo de revisión bibliográfica y las soluciones de los problemas de elucidación estructural	10
Objective test	A1 A2 A3 A5 A22 B1 B2 B3 B4 B6 C3 C1 C4 C5	Resolución de problemas de Síntesis Orgánica y de Determinación Estructural	30

Assessment comments

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.

Sources of information

Basic	<ul style="list-style-type: none">- Crews, P, Rodríguez, J., Jaspers, M. (2009). Organic Structure Analysis. 2nd Ed. Osxord University Press; New York- E. N. Jacobsen, A. Pfaltz, H. Yamamoto (1999). Comprehensive Asymmetric Catalysis . Berlin, Springer- 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.; Haunert, 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
Complementary	<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

Recommendations

Subjects that it is recommended to have taken before

Subjects that are recommended to be taken simultaneously

Subjects that continue the syllabus

Other comments

(*)The teaching guide is the document in which the URV publishes the information about all its courses. It is a public document and cannot be modified. Only in exceptional cases can it be revised by the competent agent or duly revised so that it is in line with current legislation.