Guia docente				
Datos Identificativos				2018/19
Asignatura (*)	Análisis Estructural y Planificación Sintética		Código	610500003
Titulación	Mestrado Universitario en Ciencias. Tecnoloxías e Xestión Ambiental (plan 2012)			
Descriptores				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Máster Oficial	1º cuatrimestre	Primero	Optativa	6
Idioma	Castellano			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinador/a	Maestro Saavedra, Miguel Anxo	Correo electrónico	miguel.maestro@udc.es	
Profesorado	Maestro Saavedra, Miguel Anxo	Correo electrónico	miguel.maestro@udc.es	
Web	campusvirtual.udc.es			
Descripción general	La materia está dirigida a ampliar los conocimientos de los Licenciados/Graduados en Química tanto en Determinación Estrutural como en síntesis orgánica. En un primer bloque se introducen aplicaciones de la espectrometría de masas en Química Orgánica y las técnicas bidimensionales en RMN. En un segundo bloque se estudian las estrategias en síntesis orgánica y síntesis asimétrica, asi como las nuevas metodologías.			

Competencias del título	
Código	Competencias del título
A1	Conocimiento de las realidades interdisciplinares de la Química y del Medio Ambiente, de los temas punteros en estas disciplinas y de las perspectivas de futuro.
A2	Diseño de nuevas especies químicas y materiales con propiedades determinadas.
A3	Capacitar al alumno para el desarrollo de un trabajo de investigación en un campo de la Química o del Medio Ambiente, incluyendo los procesos de caracterización de materiales, el estudio de sus propiedades fisicoquímicas y biológicas y de los procesos que pueden sufrir en el medio natural.
A4	Conocer en profundidad las características y fundamentos de diversos modelos químicos para el estudio de sistemas orgánicos, inorgánicos y biológicos, incluidos los materiales con proyección tecnológica.
A5	Capacitación para el diseño de vías de síntesis y retrosíntesis de nuevos compuestos.
A22	Dominar las técnicas instrumentales de análisis más típicas en el ámbito químico profesional.
B1	Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
B2	Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
B3	Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
B4	Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
B5	Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
B6	Ser capaz de analizar datos y situaciones, gestionar la información disponible y sintetizarla, todo ello a un nivel especializado.
B7	Ser capaz de planificar adecuadamente desarrollos experimentales, a un nivel especializado.
C1	Ser capaz de trabajar en equipos, especialmente en los interdisciplinares e internacionales.
C3	Ser capaz de adaptarse a situaciones nuevas, mostrando creatividad, iniciativa, espíritu emprendedor y capacidad de liderazgo.
C4	Expresarse correctamente, tanto de forma oral como escrita, en las lenguas oficiales de la comunidad autónoma.
C5	Dominar la expresión y la comprensión de forma oral y escrita de un idioma extranjero.
C6	Utilizar las herramientas básicas de las tecnologías de la información y las comunicaciones (TIC) necesarias para el ejercicio de su profesión y para el aprendizaje a lo largo de su vida.

C9	Valorar críticamente el conocimiento, la tecnología y la información disponible para resolver los problemas con los que deben enfrentarse.
C11	Valorar la importancia que tiene la investigación, la innovación y el desarrollo tecnológico en el avance socioeconómico y cultural de la sociedad.

Resultados de aprendizaje			
Resultados de aprendizaje	Competencias del título		
Conocimiento de las técnicas de RMN bidimensionais y las estrategias para la planificación de unaa síntesis orgánica	AM1 AM2 AM3 AM4 AM5 AM22	BM1 BM2 BM3 BM4 BM5 BM6 BM7	CM1 CM3 CM4 CM5 CM6 CM9 CM11

Contenidos	
Tema	Subtema
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 hidroboración. Reacciones de hidroformilación. Reducción de cetonas e iminas. Reacciones de hidrogenación. Reacciones con oxazoborolidinas. 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.

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competéncias	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales

Sesión magistral	A1 A2 A3 A4 A5 B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7 C3 C1 C9 C11	20	40	60
Prácticas de laboratorio	A5 A22 B1 B2 B5 B6 B7 C3 C1 C4 C6	10	14.9	24.9
Trabajos tutelados	A5 B1 B2 B3 B4 B5 B6 C3 C1 C4 C5 C6 C9	2	8	10
Prueba objetiva	A1 A2 A3 A5 A22 B1 B2 B3 B4 B6 C3 C1 C4 C5	2	8	10
Presentación oral	B4 B5 C4 C5 C6 C9 C11	1	4	5
Aprendizaje colaborativo	B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7 C3 C1	9.5	26.6	36.1
Actividades iniciales	A1 A2 A3 C9 C11	0.5	0.5	1
Atención personalizada		3	0	3
(*)Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos				

Metodologías	
Metodologías	**Descripción**
Sesión magistral	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 metodologías en Síntesis Orgánica: Microondas, síntesis en fase sólida, ultrasonidos, etc.
Trabajos tutelados	Elaboración de un informe sobre la predicción y/o interpretación de la reactividad de compuestos orgánicos con especial atención a la utilización de métodologías computacionales
Prueba objetiva	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.
Presentación oral	Exposición del trabajo tutelado, con apoyo de nuevas tecnologías.
Aprendizaje colaborativo	Preparación de las clases de exposición, resolución de ejercicios en grupos y/o individualizados.
Actividades iniciales	Presentación del curso y su programación de contenidos, actividades y criterios de evaluación

Atención personalizada	
Metodologías	**Descripción**
Prácticas de laboratorio Aprendizaje colaborativo	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.

Evaluación			
Metodologías	**Competéncias**	**Descripción**	**Calificación**
Prácticas de laboratorio	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

Trabajos tutelados	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
Presentación oral	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
Prueba objetiva	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

Observaciones evaluación
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.

Fuentes de información	
Básica	- 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
Complementária	- Hesse, M. (1995). Métodos Espectroscópicos en Química Orgánica. . Madrid, Síntesis - Eliel, E. L. (1994). Stereochemistry of Organic Compounds. New York, Wiley

Recomendaciones
Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente
Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente
Asignaturas que continúan el temario
Otros comentarios

(*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías