



| Guía Docente | | | | |
|-----------------------|--|--------------------|-----------------------|----------|
| Datos Identificativos | | | | 2019/20 |
| 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 | Castelán | | | |
| Modalidade docente | Presencial | | | |
| Prerrequisitos | | | | |
| Departamento | Química | | | |
| Coordinación | 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 | | | |
| Descrición xeral | 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 estúdiase as estratexias en síntese orgánica e síntese asimétrica, así como as novas metodoloxías. | | | |

| Competencias / Resultados do título | |
|-------------------------------------|--|
| Código | Competencias / Resultados do título |
| 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. |

| Resultados da aprendizaxe | | | |
|--|------|-------------------------------------|------|
| Resultados de aprendizaxe | | Competencias / Resultados do título | |
| Coñecemento das técnicas de RMN bidimensionais e as estratexias para a planificación dunha síntesis orgánica | AM1 | BM1 | CM1 |
| | AM2 | BM2 | CM3 |
| | AM3 | BM3 | CM4 |
| | AM4 | BM4 | CM5 |
| | AM5 | BM5 | CM6 |
| | AM22 | BM6 | CM9 |
| | | BM7 | 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 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 | | | | |
|-----------------------|--|---|-------------------------|--------------|
| Metodoloxías / probas | Competencias / Resultados | Horas lectivas (presenciais e virtuais) | Horas traballo autónomo | Horas totais |
| Sesión maxistral | 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 |
| Traballos tutelados | A5 B1 B2 B3 B4 B5 B6 C3 C1 C4 C5 C6 C9 | 2 | 8 | 10 |
| Proba obxectiva | 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 |
| Aprendizaxe colaborativa | B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7 C3 C1 | 9.5 | 26.6 | 36.1 |
| Actividades iniciais | A1 A2 A3 C9 C11 | 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 metodologías 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 metodologías computacionales |
| Proba obxectiva | 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. |
| 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 | Competencias / Resultados | Descrición | Cualificación |
| 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 |
| Traballos 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 |
| Proba obxectiva | 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 |

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">- 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 |
| 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