



| Guía docente | | | | |
|-----------------------|---|--------------------|-----------------------|-----------|
| Datos Identificativos | | | | 2018/19 |
| Asignatura (*) | Análisis Estructural y Planificación Sintética | | Código | 610500003 |
| Titulación | Mestrado Universitario en Ciencias. Tecnoloxías e Xestión Ambiental (plan 2012) | | | |
| Descriptorios | | | | |
| 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 Estructural 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, así como las nuevas metodologías. | | | |
| Plan de contingencia | | | | |

| 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 | | |
|--|-------------------------|-----|------|
| | AM | BM | CM |
| Conocimiento de las técnicas de RMN bidimensionales y las estrategias para la planificación de una síntesis orgánica | AM1 | BM1 | CM1 |
| | AM2 | BM2 | CM3 |
| | AM3 | BM3 | CM4 |
| | AM4 | BM4 | CM5 |
| | AM5 | BM5 | CM6 |
| | AM22 | BM6 | CM9 |
| | | BM7 | 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 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

| Metodologías / pruebas | Competencias | 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 metodologías 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 | Competencias | 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 | <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.; Hauernt, 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 |
| 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 |

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