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)			
Descriptores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	1º cuadrimestre	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 Estrutural como en síntese orgánica. Nun primeiro bloque introdúcense aplicacions da espectrometría de masas en Química Orgánica e as técnicas bidimensionais en RMN. Nun segundo bloque estúdianse as estratexias en síntese orgánica e síntese asimétrica, asi como as novas metodoloxías.			

Competencias do título	
Código	Competencias 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 tecnológica.
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 coñecidos 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 suizos.
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 enfrontarse.
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 do título		
Coñocemento das técnicas de RMN bidimensionais e as estratexias para a planificación dunha síntesis orgánica	AM1 AM2 AM3 AM4 AM5 AM22	BM1 BM2 BM3 BM4 BM5 BM6 BM7	CM1 CM3 CM4 CM5 CM6 CM9 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 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				
Metodoloxías / probas	Competencias	Horas presenciais	Horas non presenciais / 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 métodologías 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**	**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	- 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	- 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