

MASTER^{OO}

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA



GUÍA DOCENTE

Diseño y métodos de síntesis

1. Datos descriptivos de la materia.

Carácter: Optativa

Convocatoria: 1^{er} cuatrimestre

Créditos: 3 ECTS

Profesorado:

Alberto García Suárez

Profesor Titular de Universidad

Departamento de Química Orgánica

Facultad de Química

alberto.garcia@usc.es

Idioma en que es impartida: Castellano, gallego e inglés

2. Situación, significado e importancia de la materia en el ámbito de la titulación.

2.1. Módulo al que pertenece la materia en el Plan de Estudios. Materias con las que se relaciona.

Módulo 2 (M2) – Especialización. La asignatura se relaciona con las de Química dos productos naturales, Química orgánica biológica, Procesos catalíticos en química orgánica y Aplicaciones sintéticas dos compuestos organometálicos

2.2. Papel que juega este curso en ese bloque formativo y en el conjunto del Plan de Estudios.

Este curso trabaja con los conocimientos previos sobre reactividad de los grupos funcionales. Por ello aporta en primer lugar una revisión general de los principales métodos sintéticos. Además ayuda a obtener una visión global de la complejidad de las estructuras orgánicas y a priorizar y esquematizar rutas sintéticas a problemas de complejidad media-alta.

2.3. Conocimientos previos (recomendados/obligatorios) que los estudiantes han de poseer para cursar la asignatura.

Los alumnos han de poseer un conocimiento general de las reacciones orgánicas de los principales grupos funcionales

3. Objetivos del aprendizaje y competencias a alcanzar por el estudiante con la asignatura.

3.1. Objetivos del aprendizaje.

- Utilizar con soltura los principales tipos de reacciones orgánicas.
- Conocer y aplicar los procesos lógicos que permiten el diseño de una síntesis.
- Conocer los conceptos más importantes utilizados en el análisis retrosintético.
- Manejar y ser capaz de diseñar estrategias de síntesis de moléculas de complejidad media.
- Adquirir la capacidad para plantear esquemas retrosintéticos razonables para la síntesis de productos naturales o moléculas con interés biológico o en ciencia de materiales.

3.2. Competencias básicas y generales.

CG1 - Trabajar en equipo con eficiencia en su labor profesional y/o investigadora

CG5 - Estar bien adaptados para seguir futuros estudios de doctorado en áreas multidisciplinares

CG6 - Estar bien adaptados para desarrollar un trabajo en empresas tecnológicas relacionadas con la Química Orgánica

CG7 - Presentar públicamente los resultados de una investigación o un informe técnico

CG8 - Capacidad para aplicar el método científico y los principios de la Química Orgánica para formular y resolver problemas complejos

3.3. Competencias específicas.

CE1 - Conocer los métodos de síntesis orgánica más relevantes, incluyendo los fundamentos de los procesos

estereoselectivos en química orgánica, y ser capaz de diseñar rutas de síntesis de moléculas orgánicas complejas

CE4 - Conocer y comprender los mecanismos de reacción comúnmente aceptados en Química Orgánica y los métodos disponibles para su determinación

3.4. Competencias transversales.

CT1 - Manejar las herramientas informáticas y las tecnologías de la información y la comunicación, así como el acceso a bases de datos en línea

CT4 - Aplicar los conceptos, principios, teorías o modelos relacionados con la Química Orgánica a entornos nuevos o poco conocidos, dentro de contextos multidisciplinares

CT5 - Integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de emitir juicios y toma de decisiones, incluyendo reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas del ejercicio profesional

CT8 - Demostrar razonamiento crítico y autocrítico en búsqueda de la calidad y el rigor científico

35 17 4. Contenidos del curso.

4.1. Epígrafes del curso:

- Evolución histórica de la Síntesis Orgánica. Síntesis lineal y convergente.
- Conceptos básicos de análisis retrosintético: sintón, sintones dadores y aceptores, umpolung, sistemas consonantes y disonantes, árbol retrosintético.
- Operadores retrosintéticos. Retrón. Desconexión de sistemas monofuncionales: alcoholes, alquenos, compuestos carbonílicos, ácidos, enlaces C-C. Retrosíntesis de moléculas sencillas.
- Retrosíntesis de moléculas difuncionales y polifuncionales. Principios retrosintéticos. Aspectos regioquímicos y estereoquímicos. Enlace estratégico.
- Retrosíntesis de moléculas de complejidad media. Estrategias basadas en grupos funcionales. Estrategias basadas en el reconocimiento de subestructuras. Estrategias basadas en la topología molecular. Estrategias basadas en la estereoquímica. Retrosíntesis de productos naturales.

Contenidos teóricos:

Análisis retrosintético. Transformación. Tipos de transformaciones: desconexiones, reordenamientos, interconversión de GF, adición de GF, supresión de GF. Retrón, retrón parcial y supraretrón. Arbol retrosintético. Sintón. Unpollung. Estrategias de análisis retrosintético.

4.2. Bibliografía recomendada

4.2.1. Básica (manuales de referencia).

Borrell, J.I.; Teixidó, J.; Falcó, J. Síntesis Orgánica. Editorial Síntesis. Madrid, 1999
 Corey, E. J.; Cheng, X.-M. The Logic of Chemical Synthesis. Wiley & Sons. New York, 1989
 Warren, S.; Wyatt, P. Organic Synthesis. The Disconnection Approach. Wiley & Sons. New York, 2008

4.2.2. Complementaria.

Hanessian, S. Total Synthesis of Natural Products: the "Chiron" Approach. Pergamon Press. Oxford, 1985
 Ho, T.-L. Tactics of Organic Synthesis. Wiley & Sons. New York, 1994
 Ho, T.-L. Symmetry. A Basis for Synthesis Design. Wiley & Sons. New York, 1995
 Ho, T.-L. Evolution of synthetic pathways. Parallax and calibration. World Scientific Pub. Singapore, 1996
 Serratos, F.; Xicart, J. Organic Chemistry in Action. The Design of Organic Synthesis. Elsevier. Amsterdam, 1996
 Nicolaou, K. C.; Sorensen, E. J. Classics in Total Synthesis. Targets, Strategies, Methods. VCH. Weinheim, 1996
 Nicolaou, K. C.; Snyder, S. A. Classics in Total Synthesis II. More Targets, Strategies, Methods. Wiley & VCH. Weinheim, 2003
 Fuhrhop, J.-H.; Li, G. Organic Synthesis. Concepts and Methods. Wiley & VCH. Weinheim, 2003
 Warren, S.; Wyatt, P. Organic Synthesis. Strategy and Control. Wiley & Sons. New York, 2007
 Carda Usó, M.; Falomir, E. Síntesis Totales: Retrosíntesis y mecanismos. Publicaciones Univ. Jaume I. Castellón, 2008
 Warren, S.; Wyatt, P. Workbook for Organic Synthesis: the Disconnection Approach. Wiley & Sons. New York, 2009
 Carda, M.; Rodríguez, S.; González, F.; Murga, J.; Falomir, E.; Castillo, E. Síntesis Orgánica. Resolución de problemas por el método de desconexión. Publicaciones Univ. Jaume I. Castellón, 1996

5. - Indicaciones metodológicas y atribución de carga ECTS.

5.1. Atribución de créditos ECTS.

TRABAJO PRESENCIAL EN EL AULA	HORAS	TRABAJO PERSONAL DEL ALUMNO	HORAS
Clases expositivas en grupo grande	18	Estudio autónomo individual o en grupo	15
Clases interactivas en grupo reducido (Seminarios)	8	Resolución de ejercicios, u otros trabajos propuestos	31
Tutorías en grupo muy reducido	2	Elaboración de ejercicios propuestos.	5
Total horas trabajo presencial en el aula o en el laboratorio	28	Total horas trabajo personal del alumno	51

5.2. Actividades formativas en el aula con presencia del profesor

Análisis de problemas retrosintéticos multiestratégicos

6. Indicaciones sobre la evaluación.

6.1. Procedimiento de evaluación.

	Convocatoria ordinaria	Convocatoria extraordinaria
Valoración del examen/ Exam qualification	50%	100 %
Valoración de los seminarios y presentaciones/ Seminars and oral presentations qualification	50%	-