



## DATOS IDENTIFICATIVOS

### Química orgánica III

Asignatura	Química orgánica III			
Código	V11G200V01704			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	9	OB	4	1c
Lengua	Castellano			
Impartición	Inglés			
Departamento	Química orgánica			
Coordinador/a	Rodríguez de Lera, Angel			
Profesorado	Gándara Barreiro, Zoila Ibañez Paniello, Antonio Rodríguez de Lera, Angel Terán Moldes, María del Carmen Tojo Suarez, Emilia			
Correo-e	qolera@uvigo.es			
Web				
Descripción general	En esta asignatura se integrarán todos los conocimientos previos de materias de Química Orgánica, en particular en lo que se refiere a la síntesis orgánica y sus consecuencias en la creación de nuevos elementos estereogénico. Para ello, se hará uso de las herramientas del análisis retrosintético, con una atención especial al análisis de propuestas sintéticas que transcurren con selectividad (quimio, regio y estereoselectividad).			

## Competencias de titulación

Código	
A1	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: aspectos principales de la terminología química, nomenclatura, conversiones y unidades.
A2	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: tipos de reacción química y sus principales características asociadas
A10	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: propiedades de los compuestos alifáticos, aromáticos, heterocíclicos y organometálicos
A11	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: naturaleza y comportamiento de los grupos funcionales en moléculas orgánicas
A12	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: rasgos estructurales de los elementos químicos y sus compuestos, incluyendo la estereoquímica
A13	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principales rutas de síntesis en Química Orgánica, incluyendo las interconversiones de grupos funcionales y la formación de los enlaces carbono-carbono y carbono-heteroátomo
A19	Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica
A20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
A23	Presentar material y argumentos científicos de manera oral y escrita a una audiencia especializada
A24	Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos
A25	Manejar con seguridad sustancias químicas, considerando sus propiedades físicas y químicas, incluyendo la valoración de cualquier riesgo específico asociado con su uso
A26	Realizar procedimientos habituales de laboratorio y utilizar la instrumentación en trabajo sintético y analítico
A27	Monitorizar, mediante observación y medida de propiedades físicas y químicas, sucesos o cambios y documentarlos y registrarlos de manera sistemática y fiable
A28	Interpretar datos derivados de las observaciones y mediciones del laboratorio en términos de su significado y relacionarlos con la teoría adecuada
A29	(*)Demostrar habilidades para los cálculos numéricos e a interpretación dos datos experimentais, con especial énfase na precisión e a exactitude
B1	Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad

B3	Aprender de forma autónoma
B4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
B5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
B7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
B8	Trabajar en equipo
B9	Trabajar de forma autónoma
B12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
B13	Tomar decisiones
B14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones
B15	Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo
B18	Generar nuevas ideas y demostrar iniciativa

### Competencias de materia

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje	
1. Reconocer elementos estructurales en las moléculas orgánicas.	A2 A11 A12 A13 A23 A24	B1 B3 B7 B9 B12 B13 B14 B15 B18
2. Proponer secuencias retrosintéticas de moléculas objetivo.	A2 A11 A12 A13 A24	B1 B3 B4 B5 B7 B9 B13 B18
3. Analizar propuestas retrosintéticas alternativas.	A2 A10 A11 A12 A13 A20 A24	B1 B3 B4 B5 B7 B9 B13 B18
4. Diseñar secuencias sintéticas de moléculas objetivo.	A2 A10 A11 A12 A13 A20	B1 B3 B4 B5 B7 B9 B13 B18
5. Valorar el empleo de reacciones de simplificación estructural.	A2 A10 A11 A12 A13 A20 A24	B1 B3 B4 B7 B9 B13 B14 B18
6. Reconocer relaciones entre grupos funcionales de moléculas objetivo.	A2 A10 A11 A12 A13 A20 A24 A29	B1 B3 B4 B7 B9 B13 B18

7. Manejar adecuadamente las interconversiones entre grupos funcionales	A2	B1
	A10	B3
	A11	B4
	A12	B5
	A13	B7
	A20	B9
	A24	B13
		B14 B18
8. Proponer síntesis de compuestos carbocíclicos y heterocíclicos.	A2	B1
	A10	B3
	A11	B4
	A12	B7
	A13	B9
	A20	B13
	A24	B14
	A25	B18
	A26	
	A27	
	A28	
A29		
9. Conocer la reactividad de los compuestos heterocíclicos.	A2	B1
	A10	B3
	A11	B4
	A12	B7
	A13	B9
	A20	B13
	A24	B14
	A26	B18
	A27	
	A28	
	A29	
10. Conocer las reacciones que pueden proporcionar selectividad (quimio, regio y estereoselectividad) en las transformaciones químicas.	A2	B1
	A10	B3
	A11	B4
	A12	B5
	A13	B7
	A19	B8
	A20	B9
	A24	B13
		B14
		B18
Manejar apropiadamente las desconexiones de enlaces entre fragmentos insaturados.	A2	B1
	A10	B3
	A11	B4
	A12	B5
	A13	B7
	A20	B9
	A24	B13
		B14 B18
12. Evaluar y proponer el empleo de grupos protectores en síntesis orgánica.	A1	B1
	A2	B3
	A10	B4
	A11	B7
	A12	B9
	A13	B13
	A20	B14
	A24	B18

## Contenidos

Tema

1. EL DISEÑO DE LA SÍNTESIS ORGÁNICA. ANÁLISIS RETROSINTÉTICO	<p>1.1. Introducción a la síntesis orientada al objetivo.</p> <p>1.2. Análisis retrosintético. La aproximación del sintón. Transformas y retrones. Enlaces estratégicos. El árbol de síntesis.</p> <p>i. Evaluación preliminar.</p> <p>ii. Transformas simplificadoras.</p> <p>iii. Transformas poderosas.</p> <p>iv. Interconversión, adición y supresión de grupos funcionales.</p> <p>1.3. Estrategias sintéticas sugeridas por el ordenador.</p>
2. CRITERIOS DE SELECCIÓN DE DESCONEXIONES	<p>2.1. Desconexiones C-X de un grupo y de dos grupos (1,n).</p> <p>i. Sintones y equivalentes sintéticos.</p> <p>ii. Polaridades alternantes.</p> <p>iii. Inversión de la polaridad.</p> <p>iv. Interconversiones de grupos funcionales.</p> <p>v. Adición y supresión de grupos funcionales.</p> <p>2.2. Desconexiones C-C de un grupo y de dos grupos (1,n).</p> <p>i. Desconexiones C-C de un grupo.</p> <p>ii. Desconexiones C-C (1,n) de compuestos difuncionalizados.</p> <p>2.3. Tácticas de transformación de esqueleto. Reordenamientos y fragmentaciones.</p>
3. INTERCONVERSIONES DE GRUPOS FUNCIONALES	<p>3.1. Procesos de interconversión de grupos funcionales por sustitución, adición y eliminación.</p> <p>3.2. Reacciones de oxidación.</p> <p>i. Metales de transición (Cr y Mn).</p> <p>ii. Métodos basados en la generación de DMSO activado.</p> <p>iii. Reactivos de yodo hipervalentes.</p> <p>iv. Epoxidación y dihidroxilación de olefinas.</p> <p>3.3. Reacciones de reducción.</p>
4. QUIMIOSELECTIVIDAD. GRUPOS PROTECTORES EN SÍNTESIS ORGÁNICA	<p>4.1. Estrategias para la selección de los grupos protectores: ortogonales o de sensibilidad modulada.</p> <p>4.2. Descripción de los grupos protectores.</p> <p>i. Sensibles al medio ácido o básico.</p> <p>ii. Sensibles a fluoruro.</p> <p>iii. Sensibles a agentes reductores y oxidantes.</p> <p>iv. Otros grupos protectores.</p>
5. ESTRATEGIAS ESTEREOQUÍMICAS. ESTEREOSELECTIVIDAD	<p>5.1. Descripción de la Estereoquímica.</p> <p>i. Simetría y quiralidad. Unidades estereogénicas.</p> <p>ii. Topicidad.</p> <p>iii. Configuración relativa. Descriptores.</p> <p>5.2. Estereoquímica en reacciones químicas.</p> <p>i. Selectividad de producto.</p> <p>ii. Diastereoselectividad simple e inducida.</p> <p>5.3. Desconexiones basadas en fragmentos quirales.</p>
6. DESCONEXIONES DE COMPUESTOS INSATURADOS	<p>6.1. Síntesis estereoselectiva de olefinas.</p> <p>i. Carbaniones estabilizados por fósforo: reacción de Wittig y HWE.</p> <p>ii. Carbaniones estabilizados por silicio: reacción de Peterson.</p> <p>iii. Carbaniones estabilizados por azufre: reacción de Julia.</p> <p>iv. Transposición de Claisen.</p> <p>v. Metátesis de olefinas.</p> <p>6.2. Reacciones catalizadas por paladio.</p> <p>i. Reacción de Heck.</p> <p>ii. Acoplamiento de Stille, Negishi y Suzuki.</p>
7. FORMACIÓN Y REACTIVIDAD DE COMPUESTOS CÍCLICOS. ESTRATEGIAS TOPOLÓGICAS	<p>7.1. Formación de compuestos carbocíclicos y heterocíclicos saturados.</p> <p>i. Reacciones de ciclación. Efecto Thorpe-Ingold.</p> <p>ii. Reglas de Baldwin.</p> <p>iii. Procesos de formación de compuestos carbocíclicos.</p> <p>7.2. Formación de compuestos heterocíclicos aromáticos.</p> <p>i. Reacciones de cicloadición (3+2).</p> <p>ii. Condensación de compuestos dicarbonílicos.</p> <p>7.3. Propiedades y reactividad de compuestos heterocíclicos aromáticos.</p> <p>7.4. Estrategias topológicas en el Análisis Retrosintético.</p>
PRACTICA 1. Preparación del pentaacetato de $\beta$ -D-glucopiranos	Dos sesiones
PRACTICA 2. Preparación del pentaacetato de $\alpha$ -D-glucopiranos	Una sesión
PRACTICA 3. Reacción de Diels-Alder mediante radiación de microondas	Una sesión
PRACTICA 4. Click Chemistry: síntesis regioselectiva de triazoles 1,4 disustituidos	Una sesión

PRACTICA 5. Reactividad del metiluro de dimetilsulfoxonio con compuestos carbonílicos conjugados y no conjugados: síntesis de epóxidos y ciclopropanos	Una sesión
PRACTICA 6. Preparación de un Líquido Iónico. Aplicación en la síntesis de cumarinas	Dos sesiones
PRACTICA 7. Síntesis total de un producto natural: fenetil éster del ácido cafeico (CAPE)	Cuatro sesiones
PRACTICA 8. Reacción de Suzuki en agua	Una sesión

### Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Seminarios	26	49	75
Prácticas de laboratorio	45	13	58
Sesión magistral	13	37	50
Pruebas de respuesta corta	3	27	30
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	2	10	12

\*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

### Metodologías

	Descripción
Seminarios	En esta actividad, que tendrá lugar durante dos horas a la semana, se discutirán aquellos aspectos de mayor complejidad de la materia, y se resolverán ejercicios y problemas previamente elaborados y propuestos por el profesorado.
Prácticas de laboratorio	Se planificarán y ejecutarán experimentos de laboratorio de forma individual, en sesiones de 3.5 horas. Para ello, los alumnos dispondrán con antelación de la descripción de los experimentos, que serán explicados antes de cada sesión, por el profesorado de la materia. Todas las observaciones, cálculos, y anotaciones de cada experimento serán recogidas en un cuaderno de laboratorio, que contendrá también la discusión de las cuestiones planteadas en los experimentos y la caracterización estructural de todos los compuestos sintetizados.
Sesión magistral	El profesorado expondrá, de forma estructurada, aquellos aspectos generales de la materia con especial atención a los de mayor relevancia del programa y de mayor dificultad de asimilación por los estudiantes. En la plataforma TEMA estará disponible, con la antelación necesaria, el material de cada tema, que contiene el trabajo de los estudiantes y la programación del mismo.

### Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Sesión magistral	Resolución de problemas y/o ejercicios El profesorado dedicará el tiempo necesario para atender las necesidades y consultas de los estudiantes relacionadas con el desarrollo de la materia del curso, informando con antelación de su disponibilidad.
Seminarios	Resolución de problemas y/o ejercicios El profesorado dedicará el tiempo necesario para atender las necesidades y consultas de los estudiantes relacionadas con el desarrollo de la materia del curso, informando con antelación de su disponibilidad.
Prácticas de laboratorio	Resolución de problemas y/o ejercicios El profesorado dedicará el tiempo necesario para atender las necesidades y consultas de los estudiantes relacionadas con el desarrollo de la materia del curso, informando con antelación de su disponibilidad.
Pruebas	Descripción
Pruebas de respuesta corta	
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	

### Evaluación

	Descripción	Calificación
Seminarios		15

Se valorará tanto la resolución de problemas y cuestiones planteadas en las clases de seminario, como el trabajo personal realizado por los estudiantes en aquellas tareas de trabajo personal encomendadas por el profesorado.

- 1.- El trabajo realizado en el laboratorio: es obligatoria la asistencia a cada una de las sesiones. Se valorará la actitud y destreza del alumno en el laboratorio y la exposición de los mecanismos y espectros (30 % de la nota final).
- 2.- La libreta del laboratorio (20 % de la nota final).
- 3.- Examen escrito: tratará sobre aspectos teórico-prácticos relacionados con las prácticas realizadas. Tendrá lugar en las fechas oficiales establecidas por la Facultad (50 % de la nota final).
- Para aprobar las prácticas es indispensable haber superado cada una de las tres partes evaluadas.
- En las convocatorias extraordinarias el estudiante realizará el examen escrito y entregará una nueva libreta de laboratorio si así es requerido, manteniendo las calificaciones obtenidas durante el curso en los otros aspectos de la asignatura.

Pruebas de respuesta corta	Se llevarán a cabo dos pruebas de respuesta corta con igual valor (5% cada una).	10
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	Una prueba global para la evaluación de las competencias adquiridas en la materia. Para la superación de la materia los estudiantes deberán obtener un mínimo de un 50% en la totalidad de las pruebas escritas (pruebas de respuesta corta y prueba de respuesta larga). Por tanto, la calificación de los restantes apartados solamente se sumará cuando la puntuación obtenida en la suma de las pruebas escritas sea igual o superior a dos puntos.	45

### Otros comentarios sobre la Evaluación

La participación de los estudiantes en alguno de los actos de evaluación de la materia implicará que adquieren la condición de "presentado/a" y, por lo tanto, tendrán asignada una calificación. Se consideran actos de evaluación la asistencia a las clases de laboratorio (tres o mas sesiones), la realización de las pruebas y la entrega de un mínimo del 25% de los trabajos asignados por el profesorado.

Evaluación de la convocatoria de Julio:

1) Puntuación obtenida por los estudiantes durante el curso: máximo de 4 puntos

Se conservará la puntuación obtenida por los estudiantes durante el curso en la resolución de los problemas, trabajos, etc (máximo de 2 punto) y la realización de las prácticas de laboratorio (máximo de 2 puntos).

2) Trabajo realizado por los alumnos: máximo de 1,5 puntos

Se valorará el trabajo de resolución y presentación de los ejercicios proporcionados por el profesorado tras la evaluación de Enero, que estará orientado a la adquisición de las competencias necesarias para superar la materia. Este trabajo se entregará con antelación a la realización de la prueba oficial de esta convocatoria.

3) Prueba escrita: máximo de 4,5 puntos

Se evaluarán las competencias de la materia.

### Fuentes de información

Warren, S.; Wyatt, P., **Organic Synthesis: The Disconnection Approach**,

Wyatt, P.; Warren, S., **Organic Synthesis: Strategy and Control**,

Zweifel, G. S.; Nantz, M. H., **Modern Organic Synthesis: An Introduction**,

Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S.; Wothers, P., **Organic Chemistry**,

### Recomendaciones

#### Asignaturas que continúan el temario

Química de fármacos/V11G200V01903

#### Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Química, física y biología: Laboratorio integrado I/V11G200V01103

Química, física y geología: Laboratorio integrado II/V11G200V01202

Química orgánica I/V11G200V01304

Determinación estructural/V11G200V01501

Química orgánica II/V11G200V01504