



DATOS IDENTIFICATIVOS

Química orgánica IV: Deseño da síntese orgánica

Materia	Química orgánica IV: Deseño da síntese orgánica			
Código	V11G201V01310			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	3	2c
Lingua de impartición	#EnglishFriendly Castelán			
Departamento	Química orgánica			
Coordinador/a	Álvarez Rodríguez, Rosana			
Profesorado	Álvarez Rodríguez, Rosana Gómez Pacios, María Generosa Rodríguez de Lera, Angel Sánchez Sanz, Irene			
Correo-e	rar@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	Nesta materia integraranse todos os coñecementos previos sobre materias de Química Orgánica, en particular no que se refire á síntese orgánica e as súas consecuencias na creación de novos elementos. estereoxénico. Para iso, faranse uso das ferramentas de análise retrosintética, con especial atención á análise de propostas sintéticas que pasan con selectividade (químio, rexio e estereoselectividade).			
	Programa English Friendly: Os estudantes estranxeiros poderán solicitar ao profesorado: a) material e referencias bibliográficas para o seguimento da materia en inglés, b) asistir a titorías en inglés, c) probas e avaliacións en inglés.			

Resultados de Formación e Aprendizaxe

Código	
A3	Que os estudantes teñan a capacidade de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro da súa área de estudo) para emitir xuízos que inclúan unha reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica ou ética
A5	Que os estudantes desenvolvan aquelas habilidades de aprendizaxe necesarias para emprender estudos posteriores cun alto grao de autonomía
B3	Capacidade de xestión da información
B4	Capacidade de análise e síntese
C15	Coñecer as principais técnicas de investigación estrutural, incluíndo a espectroscopia
C19	Coñecer as principais rutas de síntese na química orgánica, incluíndo as interconversións de grupos funcionais e a formación dos enlaces carbono-carbono e carbono-heteroátomo
C27	Demostrar capacidade para a observación, o seguimento e a medida dos procesos químicos, mediante o seu rexistro sistemático e fiable e a presentación de informes do traballo realizado
C28	Interpretar os datos derivados das observacións e medidas do laboratorio en termos do seu significado e relacionalos coa teoría adecuada
D2	Capacidade para traballar en equipo

Resultados previstos na materia

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe		
Recoñecer os elementos estruturais nas moléculas orgánicas	A3	B3	C19
	A5	B4	C28
Propoñer as secuencias retrosintéticas das moléculas propostas	A3	B3	C19
	A5	B4	C28

Analizar propostas resintéticas alternativas	A3 A5	B3 B4	C19 C28	
Deseño de secuencias sintéticas de moléculas obxectivo que transcurran con selectividade	A3 A5	B3 B4	C19 C28	
Valorar o emprego de transformacións eficientes de simplificación estrutural	A3 A5	B3 B4	C19 C28	
Manexar as interconversións entre grupos funcionais e os grupos protectores	A3 A5	B3 B4	C19 C28	
Coñecer as reaccións que teñan lugar con selectividade e os seus mecanismos	A3 A5	B3 B4	C19 C28	
Aplicar no laboratorio, de xeito riguroso, as normas de seguridade e hixiene, así coma o tratamento axeitado dos residuos	A3		C15 C27 C28	D2
Recoller na libreta de laboratorio, co xeito correcto e rigurosidade, os experimentos feitos		B4	C27 C28	
Realizar a síntese dunha molécula orgánica empregando unha síntesis selectiva e por etapas	A3 A5	B3 B4	C15 C27 C28	D2

Contidos

Tema	
1. Deseño da síntese orgánica. Análise retrosintético.	1.1. Síntese orientada a obxectivos 1.2. Os principios da análise retrosintética 1.3. Criterios de selección de enlaces estratéxicas 1.4. Principios xerais de reactividade. Polaridade natural y no natural 1.5. Selectividade. Conceptos básicos 1.6. Estratexias retrosintéticas
2. Estratexia baseada nas transformas I. Criterios de selección de desconexións	2.1.. Desconexións C-X de compostos monofuncionais 2.2. Desconexións C-X de compostos difuncionais (1, n) 2.3. Desconexións C-C de compostos monofuncionais 2.4. Desconexións C-C de compostos difuncionais (1, n) 2.5. Desconexións de compostos aromáticos
3. Estratexia baseada nos grupos funcionais I. Interconversión	3.1. Interconversión de grupos funcionais. Niveis de oxidación 3.2. Reaccións de interconversión do grupo funcional 3.3. Reaccións de oxidación 3.4. Reaccións de redución
4. Estratexia baseada nos grupos funcionais II. Grupos protectores na síntese orgánica	4.1. Descrición dos grupos protectores. 4.2. Sensible ao medio ácido, axentes básicos, fluoruros, oxidantes e axentes redutores. 4.3. Selección de grupos protectores
5. Estratexia baseada nas transformas II. Desconexión de compostos insaturados	5.1. Síntese estereoselectiva de olefinas. Desconexións Csp ² =Csp ² . 5.2. Reaccións catalizadas polo paladio. Desconexións Desconexiones Csp ² -Csp ² , Csp ² -Csp, Csp-Ar y Ar-X (X = O, N).
6. Estratexia baseada na estereoquímica	6.1. Descrición da estereoquímica. Quiralidade e descritores. Topicidade 6.2. Estereoquímica nas reaccións químicas. Selectividade de produto. Diastereoselectividade sinxela e inducida.
7. Estratexias baseada na topoloxía molecular. Desconexión de compostos cíclicos	7.1. Análise retrosintética mediante estratexias topolóxicas 7.2. Retrosíntese de aneis aillados 7.3. Retrosíntese de aneis espiro 7.4. Retrosíntese de aneis fusionados 7.5. Retrosíntese de aneis mais complexos
O desafío sintético do deseño e descubrimento de compostos orgánicos con aplicacións terapéuticas.	4 sesións

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Lección maxistral	24	24	48
Seminario	24	24	48
Prácticas de laboratorio	14	16	30
Exame de preguntas de desenvolvemento	2	10	12
Exame de preguntas de desenvolvemento	2	10	12

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientador, considerando a heteroxeneidade do alumnado.

Metodoloxía docente	
	Descrición
Lección maxistral	O material da materia atoparase na plataforma Moovi
	O profesorado expondrá, de maneira clara, os aspectos máis importantes da materia de cada sesión maxistral.
Seminario	Os aspectos comentados durante as sesións maxistrais, traballaranse resolvendo problemas e exercicios formulados polos profesores.
	Ademais, a través da plataforma Moovi, os estudantes terán a oportunidade de traballar a materia resolvendo problemas e exercicios adicionais que serán avaliados.
Prácticas de laboratorio	O traballo de laboratorio desenvolverase en 4 sesións de 3,5 horas.
	Durante a execución da síntese deberán escribir, con rigurosidade e claridade, o caderno de laboratorio, que entregarse ao final das prácticas e as cuestións plantexadas polo supervisor.
	Ademais, os alumnos farán un cuestionario empregando a plataforma Moovi, sobre unha serie de preguntas sobre o traballo experimental feito.

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Lección maxistral	O profesorado dedicará o tempo necesario para responder ás preguntas dos alumnos relacionado coa materia
Seminario	O profesorado dedicará o tempo necesario para responder ás preguntas dos estudantes sobre os exercicios e problemas resoltos nas sesións do seminario, así como os propostos na Plataforma Moovi
Prácticas de laboratorio	O profesorado dedicará o tempo necesario para responder ás preguntas dos alumnos relacionado co desenvolvemento da síntese da molécula obxectivo que se fará no laboratorio. Durante as sesións de laboratorio, o profesorado supervisará o desenvolvemento dos experimentos propostos polos estudantes así como o cumprimento das medidas de seguridade e hixiene.
Probos	Descrición
Exame de preguntas de desenvolvemento	
Exame de preguntas de desenvolvemento	

Avaliación			
	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Seminario	Valorarase a resolución de exercicios e problemas adicionais, semellantes aos feitos durante as sesións do seminario, e que farasen a través da plataforma Moovi.	15	A3 B3 C15 A5 B4 C19
	Resultado da aprendizaxe:		
	- Recoñecer elementos estruturais en moléculas orgánicas.		
	- Propoñer secuencias retrosintéticas das moléculas propostas		
	- Analizar propostas retrosintéticas alternativas.		
	- Deseñar secuencias sintéticas de moléculas obxectivo que trascorren con selectividade.		
	- Avaliar o uso de transformacións de simplificación estrutural eficientes.		
	- Xestionar correctamente as interconversións entre grupos funcionais e os grupos protectores.		
	- Coñecer as reaccións que poden proporcionar selectividade e os súas mecanismos		

Prácticas de laboratorio	1. É obrigatorio realizar as prácticas de laboratorio, así coma seguir as normas de hixiene e seguridade no laboratorio e a recollida de residuos para obter a condición de APTO. 2. Ademias, valorarase: 2.1. O caderno de laboratorio (20% da nota de prácticas), análise estrutural da molécula obxectivo (25% da nota de prácticas), fichas de riesgos (10% da nota de prácticas) e resolución das cuestións plantexadas así coma o uso da nomenclatura IUPAC (15% da nota de prácticas) 2.2. Resolución dunha serie de preguntas sobre o traballo experimental, feito no laboratorio. Realizarase a través da plataforma Moovi (10%) 3. E necesario obter a condición de APTO en cada una de las partes.	25	A3 B3 C15 D2 A5 B4 C19 C27 C28
Resultado da aprendizaxe: todos			
Exame de preguntas de desenvolvemento	Realizaranse ao longo da materia dúas probas curtas (1h de duración; 10% cada unha delas) Resultado da aprendizaxe: - Recoñecer elementos estruturais en moléculas orgánicas. - Propoñer secuencias retrosintéticas das moléculas propostas - Analizar propostas retrosintéticas alternativas. - Deseñar secuencias sintéticas de moléculas obxectivo que trascorren con selectividade. - Avaliar o uso de transformacións de simplificación estrutural eficientes. - Xestionar correctamente as interconversións entre grupos grupos funcionais e os grupos protectores. - Coñecer as reaccións que poden proporcionar selectividade e os súas mecanismos	20	
Exame de preguntas de desenvolvemento	Realizaranse ao longo da materia unha longa proba escrita (2h de duración; 40%) Para aprobar a materia, os estudantes deben obter un mínimo do 50% en todas as probas escritas (proba de resposta curta e resposta longa). Polo tanto, a cualificación das seccións restantes só se engadirán cando a puntuación obtida na suma das probas escritas sexa igual ou superior a tres puntos. Resultado da aprendizaxe: - Recoñecer elementos estruturais en moléculas orgánicas. - Propoñer secuencias retrosintéticas das moléculas propostas - Analizar propostas retrosintéticas alternativas. - Deseñar secuencias sintéticas de moléculas obxectivo que trascorren con selectividade. - Avaliar o uso de transformacións de simplificación estrutural eficientes. - Xestionar correctamente as interconversións entre grupos grupos funcionais e os grupos protectores. - Coñecer as reaccións que poden proporcionar selectividade e os súas mecanismos	40	

Outros comentarios sobre a Avaliación

1. A participación dos alumnos nalgunha das actividades de avaliación da materia implicará que adquieran a condición de presentado/a, polo tanto, terán unha nota.
2. Considéranse actividades de avaliación: asistencia a sesións de laboratorio, realización de probas curtas e entrega dun mínimo do 25% dos exercicios propostos a través da plataforma Moovi.
3. Ademais, os alumnos poderán escoller ser avaliados mediante **unha proba única**, o final do cuatrimestre, e renunciar a avaliación continua. Para elo, terán que comunicalo, por escrito, o coordinador da materia o inicio do cuatrimestre (tres primeiras semáns). Nesta caso, a nota final será un máximo de 2.5 puntos das prácticas de laboratorio e un máximo de 7.5

puntos da proba escrita.

Avaliación da convocatoria de Xuño: Para superar a materia os alumnos teñen que obter unha nota igual o superior a 5 puntos, tanto na parte práctica coma nas probas escritas.

Avaliación da convocatoria de Xullo:

1. Puntuación obtida polos alumnos/as durante o curso: máximo 4 puntos (2.5 puntos as prácticas de laboratorio; 1.5 puntos os exercicios).

2. Proba escrita: máximo 6 puntos. A nota acadada no examen de Xullo substituirá as notas das probas escritas.

Información adicional:

1. Os alumnos que acadaran a condición de apto nas prácticas de laboratorio, no curso anterior, non terán que relaizar de novo o traballo do laboratorio.

2. A identificación de erros conceptuais graves, suporá a asignación de novas actividades orientadas a resolver, o mais axiña posible, os problemas de aprendizaxe. Estas actividades serán avaliadas como parte do 15% correspondentes os seminarios.

3. Para a realización das prácticas recomendase a asistencia as tutorías para correcta organización do traballo experimental.

Bibliografía. Fontes de información

Bibliografía Básica

Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S., **Organic Chemistry**, 2nd, Oxford University Press, 2012

Starkey, S., **Introduction to strategies for organic synthesis**, 1119347246, 2nd, Wiley, 2018

Bibliografía Complementaria

Warren, S.; Wyatt, P., **Organic Synthesis the Disconnection Approach**, 2nd, Wiley, 2011

Sunjic, V.; Perokovic, V. P., **Organic Chemistry from Retrosynthesis to Asymmetric Synthesis**, 1st, Springer, 2016

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Química: Laboratorio de química I/V11G201V01105

Química: Laboratorio de química II/V11G201V01110

Química: Química I/V11G201V01104

Química: Química II/V11G201V01109

Determinación estrutural/V11G201V01206

Química orgánica I/V11G201V01205

Química orgánica II/V11G201V01210

Química orgánica III: Reaccións concertadas, radicalarias e fotoquímicas/V11G201V01305
