



DATOS IDENTIFICATIVOS

Análise estrutural e Planificación Sintética

Materia	Análise estrutural e Planificación Sintética			
Código	V11M029V01136			
Titulación	Máster Universitario en Química Avanzada. RD. 1393/2007			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	5	OP	1	1c
Lingua de impartición				
Departamento	Química orgánica			
Coordinador/a	Rodríguez de Lera, Angel			
Profesorado	Álvarez Rodríguez, Rosana Fall Diop, Yagamare Rodríguez de Lera, Angel			
Correo-e	qolera@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral				

Competencias de titulación

Código	
A1	Coñecemento da terminoloxía avanzada química
A2	Coñecemento dos principios físico-químicos fundamentais que regulan os aspectos máis avanzados da Química
A3	Coñecemento dos aspectos máis avanzados dos elementos e compostos inorgánicos e orgánicos, así como biomoléculas, as rutas sintéticas e a súa caracterización estrutural
A5	Demostración avanzada de habilidades para planificar, diseñar e executar experimentos químicos
A6	Demostración de habilidades para o traballo no laboratorio á hora de realizar procedimentos químicos documentados, monitorización de propiedades químicas, eventos e documentación de todo o traballo realizado.
B1	Capacidade para deseñar, coordinar e realizar proxectos de investigación científica
B2	Capacidade de traballo en grupo
B3	Capacidade de comunicación (oral e escrita) en lingua oficial e inglés
B4	Capacidade para a xestión e tratamento de datos e xeración de información e coñecemento
B5	Capacidade de resolución eficaz e eficiente de problemas demostrando principios de orixinalidade e auto-dirección

Competencias de materia

Resultados previstos na materia	Tipoloxía	Resultados de Formación e Aprendizaxe

a) Comprender los principios del Análisis Retrosintético como herramienta para plantear saber aproximaciones sintéticas a productos de gran complejidad estructural. Analizar las diferencias entre el Análisis Retrosintético (TOS) y el Análisis Sintético Hacia Delante (DOS), comprendiendo las limitaciones en TOS en la generación de diversidad estructural. Reconocer los enlaces estratégicos que conllevan una gran simplificación de la complejidad molecular.	A1 A2 A3 A5 A6 B1 B2
b) Encontrar en la Naturaleza la fuente de inspiración para diseñar rutas sintéticas que incrementen la diversidad y complejidad moleculares.	B3 B4 B5
c) Mejorar la capacidad de abordar problemas en síntesis orgánica orientada a la diversidad, tal como el diseño de reacciones, reactivos y estrategias para la síntesis de moléculas orgánicas complejas. Concebir nuevas rutas basadas en las reacciones en tándem y las reacciones multicomponente.	
d) Familiarizarse con el equipamiento y materiales de la Química en fase sólida, así como las ventajas de la preparación de beads con un único compuesto (OBOC) para la evaluación de las librerías y para la determinación estructural/deconvolución de las mismas.	
e) Descubrir los avances en Biología posibilitados por la generación de moléculas pequeñas que interfieren, de forma condicionada, en procesos de señalización celular y de interacciones entre proteínas (Genética Química).	

Contidos

Tema	
SECCION 1. SINTESIS ORIENTADA A LA DIVERSIDAD (DOS) Y SINTESIS ORIENTADA AL OBJETIVO (TOS)	1.1 Introducción a TOS 1.2 Análisis Retrosintético
SECCION 2. DIVERSIDAD Y COMPLEJIDAD EN LA NATURALEZA: BIOSINTESIS DE PRODUCTOS NATURALES	1.2.1. Las bases del análisis retrosintético. La aproximación del síntón. [Transformas] y retrones. Enlaces estratégicos. El árbol de síntesis 1.2.2. Simplificaciones basadas en la simetría molecular, la correlación estructural y la repetición estructural
SECCION 3. SINTESIS ORGANICA EN FASE SOLIDA	1.2.3. La aproximación del SINTON: criterios de desconexión de enlaces estratégicos
SECCION 4. REACCIONES DE GENERACION DE COMPLEJIDAD	1.2.4. Desconexiones basadas en la localización de segmentos quirales: la aproximación del QUIRON
SECCION 5. ESTRATEGIAS DE DIVERSIFICACION	1.2.5. Búsqueda de estrategias por ordenador 1.3. DOS y Análisis Sintético Hacia Delante
SECCION 6. REACCIONES MULTICOMPONENTE QUE COMBINAN DIVERSIDAD Y COMPLEJIDAD ESTRUCTURALES	2.1. El metabolismo secundario 2.2. Ruta del acetato 2.3. Biosíntesis de policétidos: El complejo multienzimático ácido graso sintasa 2.4. Ruta del mevalonato 2.5. Biosíntesis de terpenos: Las enzimas terpeno ciclasas 2.6. Ruta del shikimato 2.7. Derivados de aminoácidos 2.8. Metabolitos con biogénesis mixta 3.1. Descripción de resinas, linkers, disolventes y equipamiento para la síntesis en fase sólida 3.2. Estrategias en fase sólida: split-pool y síntesis en paralelo 3.3. Estrategias de codificación 3.4. Reactivos en soporte sólido y scavengers 4.1. Introducción: Complejidad estructural 4.2. Reacciones pericíclicas en tándem 4.3. Reacciones radicálicas en tándem 4.4. Reacciones catiónicas y aniónicas en tándem 4.5. Reacciones catalizadas por metales de transición en tándem 4.6. Reacciones en tándem mixtas 5.1. Introducción: Diversidad de componentes 5.2. Diversidad Estereoquímica 5.3. Diversidad de Esqueleto Molecular y Diversidad Topológica 6.1. Reacciones multicomponente: clasificación y características 6.2. Reacciones multicomponente con isonitrilos

Planificación			
	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Resolución de problemas e/ou exercicios	10	100	110
Sesión maxistral	15	0	15

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

Metodoloxía docente	
	Descrición
Resolución de problemas e/ou exercicios	1. Resolución de problemas de TOS mediante la aplicación del Análisis Retrosintético 2. Propuesta de una síntesis orientada a la diversidad empleando estrategias de generación de complejidad y de diversificación de componentes 3. Propuesta de biogénesis de productos naturales de origen biogénético mixto
Sesión maxistral	en el que se abordarán las diferencias entre las estrategias TOS y DOS. Por una parte, el análisis retrosintético de productos naturales de gran diversidad estructural, permitirá al alumno analizar desconexiones, enlaces estratégicos y otras estrategias que simplifiquen la complejidad estructural. Por otra parte, en la estrategia DOS se plantearán rutas de diversificación y de incremento de complejidad (de esqueleto, estereoquímica) empleando como herramientas las reacciones en tándem y los procesos de formación de enlaces en reacciones de múltiples componentes. Si en TOS se ilustrará el proceso mental para sintetizar moléculas objetivo, en DOS se abordará la estrategia opuesta, partiendo de moléculas sencillas y proponiendo procesos en los que se conectan varios componentes y/o se forman varios enlaces para sintetizar moléculas que probablemente no sean accesibles a la maquinaria biosintética de los organismos. Por ello, se plantearán las rutas del metabolismo secundario más comunes, y se contrapondrán con los métodos de generación de diversidad. Otro aspecto práctico es el experimental: con el fin de familiarizar al alumno con la síntesis en fase sólida, se plantea la ejecución de una síntesis corta sobre soporte sólido.

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Resolución de problemas e/ou exercicios	Selección y entrega de material de lectura y resolución de problemas Consulta de fuentes bibliográficas Metodología de análisis retrosintético Fuentes y diversidad de productos naturales Desarrollo de prácticas de laboratorio monitorizadas

Avaliación		
	Descrición	Cualificación
Resolución de problemas e/ou exercicios	1. Resolución de problemas propuestos en clase 2. Resolución de problemas y exercicios con tempos de resolución fijados por el profesor	100

Outros comentarios sobre a Avaliación

Bibliografía. Fontes de información

- Corey, E. J.; Cheng, X. M, **The Logic of Chemical Synthesis**,
- Mann, J., **Secondary Metabolism**, 1989,
- Warren, S., **Workbook for Organic Synthesis: The Disconnection Approach**, 1992,
- Lobo, A. M.; Lourenco, A. M., **Biosíntese de produtos naturais**, 2007,
- Dewick, P. M., **Medicinal Natural Products. A Biosynthetic Approach.**, 2009,

Recomendacións
Materias que continúan o temario
Tese de Máster/V11M029V01201
Materias que se recomenda cursar simultaneamente
Determinación Estrutural Avanzada/V11M029V01130
Química de Fármacos/V11M029V01137