

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Dictado de curso de posgrado

Año	2023	Semestre	Primero	
Indique la denominación del curso (actividad curricular)				
DISEÑO LÓGICO DE MOLÉCULAS ORGÁNICAS				
Especificación clara si se lo considera válido para cubrir exigencias del Doctorado				
Se lo considera válido para cubrir las exigencias del Doctorado				
Indique el/las área/s de Doctorado para las que el curso es dirigido				
Cs. Biológicas	X	Física	Ciencias Ambientales	X
Química	X	Matemática		
Indique si el curso es o forma parte de una materia de grado. Especifique.				
No forma parte de una materia de grado				
Profesor responsable (indicando cargo docente y/o investigación y las horas que participa del dictado de clases)				
Dr. Pedro A. Colinas (Profesor Titular DS-Investigador Independiente (CONICET) 40 hs.				
Docentes participantes (indicando cargo docente y/o investigación y las horas que participa del dictado de clases)				
Dr. Leonardo E. Riafrecha (Jefe de Trabajos Prácticos DS-Investigador Asistente (CONICET) 20 hs. Lic. Macarena Le Pors (Ayudante Diplomada DS- Becaria doctoral (CONICET) 20 hs.				
Característica del curso (Teórico, práctico, teórico-práctico, etc)	Teórico-Práctico			
Modalidad del curso (presencial, a distancia, combinada). Indicar en porcentaje el dictado a distancia.	Modalidad a distancia			
Carga horaria semanal	8 hs semanales			
Duración total en horas (distinguir horas de teoría, práctica, teoría/práctica, presencial y a distancia)	40 hs de teoría-práctica (a distancia). 5 hs. evaluación (a distancia)			
Tipo de evaluación y requisitos de aprobación (máx. 2000 caracteres). Si la evaluación no es presencial indicar los instrumentos y soportes que se emplearán para evaluar los aprendizajes y competencias de los/as alumnos/as.				

El tipo de evaluación es escrita y quienes lo desarrollen deberán presentar una propuesta de síntesis de moléculas de elevada complejidad demostrando el manejo de diversas metodologías sintéticas.

Ámbito o lugar de desarrollo (Instituto, Centro, Laboratorio, cátedra, aula, etc). Si hay más de uno indicar cuántas horas en c/u y qué actividades se desarrollarán en cada lugar

Centro de Estudio de Compuestos Orgánicos (CEDECOR, UNLP-CIC), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)

Comienzo del dictado	27-2-2023	Cupo de alumnos/as	30
----------------------	-----------	--------------------	----

Breve descripción de los contenidos y su vinculación con los objetivos de la carrera (máx. 1000 caracteres)

El presente curso tiene como objetivo diseñar moléculas orgánicas utilizando el análisis lógico de las mismas a través del método de las desconexiones. Tradicionalmente la síntesis orgánica se enseña a través del conocimiento de una serie de reacciones útiles para la obtención de los compuestos deseados. Esta metodología involucra el aprendizaje de una enorme cantidad de información, complicada además por los nombres asignados a cada una de las reacciones mencionadas. La metodología para un enfoque sistemático para el diseño de la síntesis de una molécula orgánica fue ideada por el Prof. Elías James Corey (quien obtuvo el Premio Nobel de Química en 1990 por este aporte). La misma requiere someter a la molécula objetivo, a un ejercicio intelectual de abstracción, llamado análisis retrosintético o análisis lógico. Esto implica una evaluación de cada grupo funcional en la molécula objetivo y la estructura del esqueleto carbonado de la molécula independizándose de las reacciones involucradas

Arancelamiento

NO		SÍ	X (sólo inscriptos de empresas o universidades extranjeras)	Monto	U\$\$ 100 (Valor dólar Banco Nación del Comienzo del curso)
----	--	----	---	-------	---

Destino de los fondos	Se destinará a la compra de materiales necesarios para el dictado del curso y material bibliográfico.
-----------------------	---

Mecanismo de pago y administrador de fondos	A través de la Fundación Ciencias Exactas
Describir los objetivos del curso (máx. 2000 caracteres)	
<p>.</p> <p>Como objetivos del presente curso se plantean:</p> <ul style="list-style-type: none"> -Diseñar moléculas orgánicas empleando el análisis retrosintético. -Realizar el análisis antitético de la molécula objetivo planteando las desconexiones apropiadas. -Diseñar el “árbol” retrosintético identificando desconexiones lógicas e ilógicas. -Plantear las síntesis surgidas del análisis lógico analizando su viabilidad. 	
Indicar los contenidos del curso (máx. 2000 caracteres)	
<p>Los contenidos del curso se adjuntan dentro del programa detallado de actividades</p>	
Si corresponde, describir las actividades prácticas previstas, indicando lugar donde se desarrollarán, modalidad de supervisión y modalidades de evaluación (máx. 2000 caracteres).	
<p>Se desarrollarán las siguientes unidades temáticas que involucrarán la exposición de los temas y conjuntamente la realización de ejercicios de aplicación. El dictado del presente curso se realizará en encuentros semanales de 8 horas en horario a coordinar con los participantes. Posteriormente se indica el número de horas dedicado aproximadamente a cada unidad.</p>	
Si el curso incluye horas a distancia indicar las previsiones metodológicas y pedagógicas, las actividades que se realizarán en las horas presenciales y en las virtuales y el modo en que se articularán, las interacciones docente-estudiantes y estudiantes-estudiantes previstas, y los mecanismos de seguimiento, supervisión y evaluación de esas actividades.	
<p>Se utilizará la plataforma Moodle donde los participantes tendrán acceso a la bibliografía así como videos de las clases teóricas y prácticas. Asimismo, se utilizará el foro disponible para atender consultas además del empleo de otros medios de comunicación como Whatsapp que garanticen una interrelación adecuada entre los docentes y participantes. Las resoluciones de los problemas prácticos podrán ser presentadas, por aquellos participantes que lo crean conveniente, en la sección Tareas a fin de que los docentes hagan una devolución sobre las mismas. Se incentivará a los estudiantes a utilizar el foro para facilitar el intercambio de ideas, el cuál además se fomentará en las clases.</p>	

Contacto con el responsable	
Lugar de Trabajo	Centro de Estudio de Compuestos Orgánicos (CEDECOR, UNLP-CIC), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)
Teléfono	221-4243104
Correo electrónico	pcolinas@quimica.unlp.edu.ar

Adjuntar programa detallado de actividades

Unidad 1: Metodología de la Síntesis Orgánica (6 horas)

Perspectiva histórica. Estrategias sintéticas. Elección de la molécula objetivo. Síntesis convergente y consecutiva. Análisis retrosintético. Método de las desconexiones o método del sintón. Terminología utilizada.

Unidad 2: Estrategia general del método de las desconexiones (6 horas)

Lógica de la síntesis orgánica. Principios generales para la formación eficiente de enlaces C-C. Reglas para una buena estrategia. Sintones. Clasificación. Reactividad natural e invertida.

Unidad 3: Desconexión de compuestos monofuncionales. (6 horas)

Desconexión de un grupo C-X (heteroátomo), de alcoholes, olefinas, compuestos monocarbonílicos.

Unidad 4: Desconexión de compuestos difuncionales (15 horas)

Modelos de desconexión 1,2-dioxigenados: compuestos α -hidroxicarbonílicos.
Desconexión 1,3-dioxigenado: compuestos β -dicarbonílicos y carbonílicos α,β -insaturados.
Modelo 1,4-dioxigenado: Compuestos 1,4-dicarbonílicos. Sintones ilógicos
Modelo de desconexión 1,5-dioxigenado .
Desconexión de compuestos 1,6-difuncionalizados.

Unidad 5: Estrategias sintéticas para la formación de compuestos heterocíclicos (9 horas)

Modelos para ciclación intramolecular. Heterociclos con un solo heteroátomos.
Heterociclos con varios heteroátomos: 1,2; 1,3 y 1,4. Ciclación intermolecular.
Cicloadiciones. Modelos para la síntesis de heterociclos condensados: quinoleínas, isoquinoleínas, benzodiazinas, indoles, benzofuranos y benzotiofenos.

Unidad 6: Programas informáticos para el análisis lógico de moléculas orgánicas (3 horas)

LHASA. MASA. Chematica.

Evaluación: a través de la realización de ejercicios de aplicación se verificará la aprehensión de los conocimientos explicados durante el curso. Al finalizar el mismo se realizará una evaluación escrita que involucrará el análisis lógico de una molécula objetivo, el planteo de la retrosíntesis formal y de las vías sintéticas factibles.

Bibliografía

1. a) Corey, E. J.; Cheng, X.-M. *The Logic of Chemical Synthesis*; Wiley: New York, 1989.
2. a) Nicolaou, K. C.; Snyder, S. A. *Classics in Total Synthesis I: More Targets, Strategies, Methods*; Wiley: New York, 2003.(b) Nicolaou, K. C.; Sorenson, E.-J. *Classics in Total Synthesis*; VCH: Weinheim, 1996.
3. Waren, S. *Diseño de Síntesis Orgánica*-Alhambra, 1983.
4. Hudlický, T.; Reed, J. W. *The Way of Synthesis*; Wiley: Weinheim, 2007.
5. Arndt, A.; Kunde, T.; Mahrwald, R. *ChemTexts* **2016**, 2 (1).
6. K Molga, P Dittwald and B Grzybowski, *Chem. Sci.* **2019**, DOI: 10.1039/c9sc02678a