



DATOS IDENTIFICATIVOS

Síntesis estereoselectiva de compuestos bioactivos

Asignatura	Síntesis estereoselectiva de compuestos bioactivos			
Código	V11G201V01405			
Titulación	Grado en Química			
Descriptor	Creditos ECTS	Selección	Curso	Cuatrimestre
	6	OP	4	1c
Lengua	Castellano			
Impartición	Departamento Química orgánica			
Coordinador/a	Rodríguez de Lera, Angel			
Profesorado	Rodríguez de Lera, Angel			
Correo-e	qolera@uvigo.es			
Web	http://https://cinbio.es/orchid			
Descripción general	<p>Tras haber recibido formación en las propiedades de los grupos funcionales y en los procesos de transformación entre los mismos, se abordará en este curso la creación de nuevos estereocentros en moléculas orgánicas, y se detallarán las consideraciones conformacionales y electrostáticas de las moléculas que puedan participar en la creación de nuevos estereocentros.</p> <p>Los estudiantes internacionales pueden solicitar al profesorado el material del curso en inglés, así como recibir tutorías, pruebas y evaluaciones en dicho idioma.</p>			

Resultados de Formación y Aprendizaje

Código				
A4	Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado			
A5	Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía			
B4	Capacidad de análisis y síntesis			
C42	Conocer estrategias sintéticas que permitan la obtención estereoselectiva de compuestos con actividad biológica			
D1	Capacidad para resolver problemas			
D2	Capacidad para trabajar en equipo			

Resultados previstos en la materia

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje			
Nueva	A4	B4	C42	D1
	A5			D2

Contenidos

Tema	
------	--

(*)1. FUNDAMENTOS DA SÍNTESE

ESTEREOSELECTIVA

- 1.1. Introducción. Evolución da síntese estereoselectiva
- 1.2. Descripción da estereoselectividade
 - 1.2.1. Simple
 - 1.2.2. Inducida
 - 1.2.2.1. Inducida polo sustrato
 - 1.2.2.2. Inducida polo auxiliar
 - 1.2.2.3. Inducida polo aditivo
 - 1.2.2.4. Ligandos enantiopuros
- 1.3. Análisis Conformacional
 - 1.3.1. Alcanos
 - 1.3.2. Olefinas. Tensión alílica
 - 1.3.3. Ciclohexanos e derivados
 - 1.3.4. Tetrahidropiranos. O efecto anomérico
 - 1.3.5. Tensión I
 - 1.3.6. Compuostos bicíclicos
 - 1.3.7. A regra de Fürst-Plattner

(*)2. CINÉTICA E TERMODINÁMICA DAS

REACCIÓNES ESTEREOSELECTIVAS

- 2.1. Procesos de creación de novos estereocentros
 - 2.1.1. Reaccións non estereoselectivas
 - 2.1.2. Reaccións estereoselectivas
- 2.2. Análisis de traxectorias de adición nucleófila
- 2.3. Postulado de Hammond
- 2.4. O principio de Curtin-Hammett
- 2.5. Reaccións organocatalizadas
 - 2.5.1. Modos de activación con organocatalizadores
 - 2.5.2. Reaccións en cascada organocatalizadas

(*)3. PROCESOS DE OXIDACIÓN ASIMÉTRICA

- 3.1. Epoxidación asimétrica de Sharpless
 - 3.1.1. Fundamento e aplicacións
 - 3.1.2. Modelo de enantioselectividade
 - 3.1.3. Aplicacións sintéticas
- 3.2. Epoxidación asimétrica de Jacobsen
 - 3.2.1. Fundamento e aplicacións
 - 3.2.2. Modelo de enantioselectividade
 - 3.2.3. Aplicacións sintéticas
- 3.3. Dihidroxilación asimétrica de Sharpless
 - 3.3.1. Fundamento e aplicacións
 - 3.3.2. Modelo de enantioselectividade
 - 3.3.3. Aplicacións sintéticas

(*)4. PROCESOS DE REDUCCIÓN ASIMÉTRICA

- 4.1. Hidroxenación enantioselectiva catalítica de olefinas
 - 4.2. Reducción enantioselectiva de cetonas
 - 4.2.1. Reacción de Corey-Bakshi-Shibata (CBS)
 - 4.2.2. Reducción diastereoselectiva de α -hidroxicetonas
 - 4.2.3. Reducción diastereo e enantioselectiva de α -dicarbonilos
-

- (*)5. PROCESOS DE FORMACIÓN ESTEREOSELECTIVA DE ENLACES C-C
- 5.1. Adición enantioselectiva a grupos carbonilo
- 5.1.1. Reacción de organozincios
- 5.1.2. Reacción de derivados de alquínilo
- 5.1.3. Reacción de Nozaki-Hiyama-Kishi
- 5.2. Adición conxugada enantioselectiva a compostos π -insaturados
- 5.2.1. Adición de organozincios
- 5.2.2. Reducción asimétrica
- 5.2.3. Adición de heteroátomos
- 5.2.3. Alquilación de enolatos
- 5.2.4. Alquilación de azaenolatos
- 5.3. Reacciones enantioselectivas organocatalizadas
- 5.3.1. Adición conxugada
- 5.3.2. Epoxidación
- 5.3.3. Oxidación de cetonas
- 5.3.4. Adiciones conxugadas con inversión de polaridade
- 5.3.5. Reacciones organocatalizadas en cascada

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Lección magistral	24	24	48
Seminario	12	36	48
Prácticas de laboratorio	14	11	25
Resolución de problemas y/o ejercicios	0	27	27
Examen de preguntas de desarrollo	1	0	1
Examen de preguntas de desarrollo	1	0	1

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

Metodologías

	Descripción
Lección magistral	(*)Descripción, por parte del profesorado, dos contidos sobre a materia obxecto do estudo, bases teóricas e/ou directrices dun traballo, exercicio ou proxecto a desenvolver polos estudantes.
Seminario	(*)Actividade de consolidación dos coñecementos adquiridos ao propoñer e resolver problemas de transformacións estereoselectivas na construción de esqueletos funcionalizados con estereocentros.
Prácticas de laboratorio	(*)Desenvolvemento práctico de tres procesos de síntese estereoselectiva empregando catalizadores quirais enantiopuros, incluíndo a organocatálise, complementado co análise espectroscópico dos estereoisómeros maioritarios das transformacións sintéticas.

Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Lección magistral	
Seminario	
Prácticas de laboratorio	
Pruebas	Descripción
Resolución de problemas y/o ejercicios	

Evaluación

	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje
Prácticas de laboratorio	La evaluación de las clases de prácticas se realizará de forma continua, con cuestiones del profesorado sobre el contenido y desarrollo, así como en la Memoria de las mismas. Supodrá un 15% de la cualificación final. Se exige una nota mínima de 4.0 puntos sobre 10.0 para superar la materia.	15	A4 B4 C42 D1 A5 D2

Resolución de problemas y/o ejercicios	Cada estudiante tendrá a su disposición las tutorías con los profesores de la materia para resolver de forma individualizada las dudas que puedan surgir a lo largo del curso en cualquiera de los aspectos: clases de teoría, clases de seminario o resolución de problemas y/o actividades autónomas. El objetivo de las tutorías es contribuir a que los estudiantes puedan afianzar sus conocimientos y enfrentarse en mejores condiciones a las distintas actividades de evaluación propuestas (pruebas escritas, resolución de ejercicios).	40	A4 A5	B4	C42	D1 D2
Entregables:						
El alumnado realizará trabajos relacionados con contenido de la materia. Estos trabajos deberán ajustarse a los parámetros especificados por el profesorado, y se presentarán de forma escrita a través de la plataforma habilitada o a través de exposición oral y formará parte de la evaluación continua (20%).						
Examen de preguntas de desarrollo	Una prueba sobre los contenidos de los primeros temas, que supondrá el 15% de la calificación final. Se exige una nota mínima de 2.5 puntos sobre 10.0 en esta prueba para superar la materia.	15	A4 A5	B4	C42	D1 D2
Examen de preguntas de desarrollo	Una prueba sobre TODOS LOS CONTENIDOS DE LA MATERIA, que supondrá un 30% de la calificación final. Se exige una nota mínima de 4.0 puntos sobre 10.0 en esta prueba para superar la materia.	30	A4 A5	B4	C42	D1 D2

Otros comentarios sobre la Evaluación

Prácticas de laboratorio:

La asistencia a las clases prácticas de laboratorio es obligatoria.

El trabajo de laboratorio será evaluado como APTO/A o NO APTO/A. En este apartado se incluirán los siguientes aspectos: trabajo previo y/o posterior, desarrollo de trabajo experimental y cuaderno de laboratorio. La evaluación del desarrollo del trabajo experimental se realizará utilizando la herramienta de observación sistemática.

Para que el alumnado supere la materia deberá obtener la calificación de APTO en el trabajo de prácticas de laboratorio.

En el caso de que no se superen los mínimos exigidos en alguna de las pruebas anteriores, la calificación final será la calificación ponderada de la prueba de evaluación global.

Mínimos exigibles:

La identificación de errores conceptuales graves, conllevará una asignación de actividades específicas orientadas a adquirir dichas competencias. Estas actividades serán evaluadas como parte de 20% correspondiente a los entregables.

CONDICIÓN DE PRESENTADO/La: La participación del/la estudiante en alguno de los actos de evaluación de la materia implicará la condición de presentado/a y, por lo tanto, la asignación de una calificación. Se consideran actos de evaluación la asistencia a clases prácticas de laboratorio, la entrega de trabajos y ejercicios encargados por el profesorado, o la realización de la alguna prueba.

EVALUACIÓN EN JULIO: se mantendrá la calificación obtenida por el alumnado durante lo curso en resolución de problemas, prácticas de laboratorio y trabajos. Se realizará una prueba sobre todos los contenidos teóricos de la materia que supondrá un 45% de la calificación final; y una prueba escrita de la parte experimental que supondrá un 15% de la calificación final. Será necesario alcanzar en esta pruebas un mínimo de 4 puntos sobre 10 para superar la materia y para tener en cuenta el resto de los elementos de evaluación.

ALUMNADO DE 2ª Y POSTERIORES MATRÍCULAS: Al estudiante que fuera evaluado con APTO/A en el trabajo de laboratorio durante el curso 2020-21 se le otorgará mención de APTO/A en el trabajo de laboratorio del curso académico 2021-22, no siendo necesaria la realización de los experimentos nuevamente. Sin embargo, deberán realizar el Trabajo (10%) y la prueba escrita de la parte experimental (15%) para conseguir la calificación correspondiente a la parte experimental de la materia en el curso académico 2021-22.

OPCIÓN DE EVALUACIÓN NO CONTINUA: el alumnado que desee no optar a la evaluación continua deberá realizar y superar la evaluación de las Prácticas de Laboratorio (calificación APTO/A en el trabajo desarrollado en el laboratorio y calificación igual o superior a 5 puntos sobre 10 en la prueba escrita de la parte experimental). Además deberá obtener como mínimo 5 puntos sobre 10 en una prueba en la que se evaluarán todos los contenidos de la materia.

Fuentes de información

Bibliografía Básica

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

Zweifel, G. S.; Nantz, M. H.; Somfai, P., **Modern Organic Synthesis. An Introduction**, Wiley, 2017

Bibliografía Complementaria

Corey, E. J.; Kürti, L., **Enantioselective Chemical Synthesis. Methods, Logic and Practice**, Direct Book Publishing, Dallas: Texas, 2010

Corey, E. J.; Czakó, B.; Kürti, L., **Molecules and Medicines**, Wiley, 2007

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Química orgánica III: Reacciones concertadas, radicalarias y fotoquímicas/V11G201V01305

Química orgánica IV: Diseño de la síntesis orgánica/V11G201V01310
