



DATOS IDENTIFICATIVOS

Síntese estereoselectiva de compostos bioactivos

Materia	Síntese estereoselectiva de compostos bioactivos			
Código	V11G201V01405			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OP	4	1c
Lingua de impartición	Castelán			
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			
Descrición xeral	<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 e Aprendizaxe

Código				
A4	Que os estudantes poidan transmitir información, ideas, problemas e solución a un público tanto especializado coma non especializado			
A5	Que os estudantes desenvolvan aquelas habilidades de aprendizaxe necesarias para emprender estudos posteriores cun alto grao de autonomía			
B4	Capacidade de análise e síntese			
C42	Coñecer estratexias sintéticas que permitan a obtención estereoselectiva de compostos con actividade biolóxica			
D1	Capacidade para resolver problemas			
D2	Capacidade para traballar en equipo			

Resultados previstos na materia

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
(*)Nueva	A4 A5	B4	C42	D1 D2

Contidos

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 REACCIÓNS

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. Reaccións enantioselectivas organocatalizadas
- 5.3.1. Adición conxugada
- 5.3.2. Epoxidación
- 5.3.3. Oxidación de cetonas
- 5.3.4. Adicións conxugadas con inversión de polaridade
- 5.3.5. Reaccións organocatalizadas en cascada

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Lección maxistral	24	24	48
Seminario	12	36	48
Prácticas de laboratorio	14	11	25
Resolución de problemas e/ou exercicios	0	27	27
Exame de preguntas de desenvolvemento	1	0	1
Exame de preguntas de desenvolvemento	1	0	1

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

Metodoloxía docente

	Descrición
Lección maxistral	Descrición, 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 mayoritarios das transformacións sintéticas.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Lección maxistral	Cada estudante poderá solicitar ao docente as aclaracións que estime oportunas para unha mellor comprensión da materia e sobre a resolución con éxito dos exercicios e problemas propostos. Esta consulta pode tamén ser atendida en horario de titorías. Os horarios e despachos das mesmas estarán recollidas na páxina web do centro.
Seminario	Cada estudante poderá solicitar ao docente las aclaraciones que estime oportunas para unha mellor comprensión da materia e sobre a resolución con éxito dos exercicios e problemas propostos. Esta consulta pode tamén ser atendida en horario de titorías. Os horarios e despachos das mesmas están recollidas na páxina web do centro.
Prácticas de laboratorio	As prácticas de laboratorio xa presentan o deseño de aprendizaxe previo e a proposta metodolóxica que requiren antes da execución práctica. Os profesores atenden as mesmas de forma personalizada.
Probas	Descrición
Resolución de problemas e/ou exercicios	Similar ao indicado en Seminario.

Avaliación

	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Prácticas de laboratorio	A avaliación das clases de prácticas de xeito continuo, con cuestións do profesorado sobre o contido e desenvolvemento, así como e a Memoria das mesmas, suporá un 15% da cualificación final. Esixirase unha nota mínima de 4.0 puntos sobre 10.0 para superar a materia.	15	A4 A5	B4	C42	D1 D2
Resolución de problemas e/ou exercicios	Cada estudante terá á súa disposición as titorías cos profesores da materia para resolver de forma individualizada as dúbidas que poidan xurdir ao longo do curso en calquera dos seus aspectos: clases de teoría, clases de seminario ou resolución de problemas e/ou actividades autónomas. O obxectivo de ditas titorías é o de contribuir a que os estudantes poidan afianzar os seus coñecementos e enfrentarse en mellores condicións as distintas actividades de avaliación propostas (probos escritas, resolución de exercicios). Entregables: O alumnado realizará traballos relacionados co contido da materia. Estes traballos deberán axustarse aos parámetros especificados polo profesorado, e presentaranse de forma escrita a través da plataforma habilitada ou a través dunha exposición oral e formarán parte da avaliación continua (20%).	40	A4 A5	B4	C42	D1 D2
Exame de preguntas de desenvolvemento	Unha proba sobre os contidos dos primeiros temas, que suporá o 15% da cualificación final. Esixirase unha nota mínima de 2.5 puntos sobre 10.0 nesta proba para superar a materia.	15	A4 A5	B4	C42	D1 D2
Exame de preguntas de desenvolvemento	Unha proba sobre TODOS OS CONTIDOS DA MATERIA, que suporá un 30% da cualificación final. Esixirase unha nota mínima de 4.0 puntos sobre 10.0 nesta proba para superar a materia.	30	A4 A5	B4	C42	D1 D2

Outros comentarios sobre a Avaliación

Prácticas de laboratorio:

A asistencia ás clases prácticas de laboratorio é obrigatoria.

O traballo de laboratorio será avaliado como se indicóu con anterioridade. Neste apartado incluíranse os seguintes aspectos: traballo previo e/ou posterior, desenvolvemento do traballo experimental e caderno de laboratorio. A avaliación do desenvolvemento do traballo experimental realizarase utilizando a ferramenta de observación sistemática.

Para que o alumnado supere a materia deberá obter a cualificación de APTO no traballo de prácticas de laboratorio.

No caso de que non se superen os mínimos esixidos nalguna das probas anteriores, a cualificación final obtida na materia será a cualificación ponderada da proba de avaliación global.

Mínimos esixibles:

A identificación de erros conceptuais graves, conlevará unha asignación de actividades específicas orientadas a adquirir ditas competencias. Estas actividades serán avaliadas como parte do 20% correspondente aos entregables.

AVALIACIÓN EN XULLO: manterase a cualificación obtida polo alumnado durante o curso en resolución de problemas, prácticas de laboratorio e traballos. Realizarase unha proba sobre todos os contidos teóricos da materia que suporá un 45% da cualificación final e unha proba escrita da parte experimental que suporá un 15% da cualificación final. Será necesario alcanzar nestas probas un mínimo de 4 puntos sobre 10 para superar a materia e para ter en conta o resto dos elementos de avaliación.

ALUMNADO DE 2ª E POSTERIORES MATRÍCULAS: Ao estudantado que fose avaliado con APTO/A no traballo de laboratorio no curso anterior outorgaráselle mención de APTO/A no seguimento do traballo de laboratorio no curso académico actual, non sendo necesaria a realización dos experimentos novamente. Con todo, deberán realizar os entregables e a proba escrita da parte experimental para conseguir a cualificación correspondente á parte experimental da materia no curso académico actual.

CONDICIÓN DE PRESENTADO/A: A participación do/a estudante nalgún dos actos de avaliación da materia implicará a condición de presentado/a e, polo tanto, a asignación dunha cualificación. Considéranse actos de avaliación a asistencia a

clases prácticas de laboratorio, a entrega de traballos e exercicios encargados polo profesorado, ou a realización de algunha proba.

OPCIÓN DE AVALIACIÓN NON CONTINUA: (provisional). A UVigo está a elaborar unha normativa ao respecto) o alumnado que desexe non optar á avaliación continua deberá solicitalo durante as tres primeiras semanas de curso á persoa coordinadora da materia. Para superar a materia deberá realizar as Prácticas de Laboratorio, acadar cualificación APTO/A no traballo desenvolvido no laboratorio e cualificación igual ou superior a 5 puntos sobre 10 na proba escrita da parte experimental. Ademais deberá obter como mínimo 5 puntos sobre 10 nunha proba na que se avaliarán todos os contidos da materia.

Bibliografía. Fontes 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.; Czako, B.; Kürti, L., **Molecules and Medicines**, Wiley, 2007

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

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

Química orgánica IV: Deseño da síntese orgánica/V11G201V01310