



Guía docente				
Datos Identificativos				2016/17
Asignatura (*)	Síntesis estereoselectiva	Código	610509012	
Titulación	Mestrado en Investigación Química e Química Industrial (plan 2016)			
Descriptores				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Máster Oficial	Anual	Primero	Optativa	3
Idioma	Castellano			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Fundamental			
Coordinador/a	Perez Sestelo, Jose	Correo electrónico	jose.perez.sestelo@udc.es	
Profesorado	Perez Sestelo, Jose	Correo electrónico	jose.perez.sestelo@udc.es	
Web	miiquimica.webnode.es			
Descripción general	<p>Se trata de una materia de la Especialidad 2: Química Sintética. Se relaciona fundamentalmente con las asignaturas de dicha especialidad, y guarda también relación con asignaturas de las especialidades de Química Biológica (Química de Biomoléculas, Química Médica y Química de Productos Naturales) y la especialidad de Nanoquímica y Nuevos Materiales (Materiales Moleculares, etc.).</p> <p>Esta asignatura aborda el estudio de la creación de (nuevos) estereocentros a partir de sustratos que contienen estereocentros o unidades proestereogénicas (enlaces múltiples C=C o C=X). Por ello, incorpora conceptos fundamentales para la formación en síntesis, tales como el análisis de la Estereoquímica en reacciones químicas, el análisis conformacional de los compuestos orgánicos y los modelos de reactividad, incluyendo la diastereoselectividad inducida por el sustrato, por el auxiliar quiral o por un aditivo (catalizador, ligando) quiral no racémico</p>			

Competencias del título	
Código	Competencias del título
A1	Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química
A2	Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas
A4	Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.
A7	Operar con instrumentación avanzada para el análisis químico y la determinación estructural
A8	Analizar y utilizar los datos obtenidos de manera autónoma en los experimentos complejos de laboratorio relacionándolos con las técnicas químicas, físicas o biológicas apropiadas, e incluyendo el uso de fuentes bibliográficas primarias
B1	Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
B2	Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
B3	Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
B4	Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
B5	Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
B7	Identificar información de la bibliografía utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación.
B10	Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química
B11	Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional

## Resultados de aprendizaje



Resultados de aprendizaje	Competencias del título		
Utilizar la terminología de la reactividad química, y la descripción apropiada de las reacciones estereoselectivas.	AM1	BM10	
Capacidad para manejar y comunicar, tanto por escrito, como de forma oral, los conceptos básicos de estereoquímica dinámica en Química Orgánica.		BM2 BM4 BM10	
Familiarizarse con la representación tridimensional de las moléculas, valorando adecuadamente las conformaciones accesibles a las mismas		BM1 BM2 BM3 BM7 BM10	
Capacidad para visualizar estructuras moleculares mediante el manejo de modelos generados por cálculos mecanocuánticos	AM2 AM4 AM7	BM1 BM2 BM3 BM7 BM11	
Entender la relación entre la estructura tridimensional de los compuestos orgánicos y su reactividad		BM1 BM2 BM10	
Comprender las propiedades estructurales y la reactividad de los centros proestereogénicos en los procesos en los que se generan elementos estereogénicos	AM1	BM1	
Explicar de modo racional el resultado de una reacción química en lo referente a la Estereoquímica del proceso		BM1 BM4 BM7	
Conocer los principales tipos de reacciones de creación de centros estereogénicos, entendiendo sus mecanismos.	AM1	BM1 BM3 BM4 BM10	
Entender los efectos estereoelectrónicos que operan en la reactividad química	AM1	BM1 BM4 BM5	
Valorar la importancia del análisis de estructuras de transición de las reacciones químicas, y visualizar las mismas obtenidas por cálculos mecanocuánticos	AM2 AM4 AM7	BM1 BM2 BM3 BM7 BM11	
Entender cómo la quiralidad de compuestos naturales enantiopuros puede transmitirse a otros productos quirales no racémicos a través de transformaciones químicas	AM1 AM8	BM1 BM2 BM5 BM10	
Comprender a cuantificar las proporciones relativas de diastereoisómeros y enantiómeros empleando métodos químicos y físicos	AM1		
Predecir el resultado de una reacción química en la que se generan nuevos estereocentros	AM1	BM1	
Resolver secuencias sintéticas para la obtención de moléculas quirales no racémicas	AM1	BM4 BM5 BM11	
Adquirir y utilizar información bibliográfica referida a los procesos sintéticos en los que se generan estereocentros		BM7 BM10	

## Contenidos



Tema	Subtema
Tema 1. Estereoquímica en reacciones químicas	Quiralidad. Unidades estereogénicas. Topicidad. Diastereoselectividad y enantioselectividad. El "reservorio quiral": auxiliares y ligandos quirales. Resolución cinética.
Tema 2. Análisis conformacional y reactividad química	Control conformacional de la diastereoselectividad. Análisis conformacional. Tensión alílica. Efectos estereoelectrónicos. El principio de Curtin-Hammett
Tema 3. Adiciones a centros trigonales C=C.	Adiciones a enlaces C=C. Epoxidaciones diastereoselectivas de olefinas acíclicas y cíclicas. Epoxidaciones enantioselectivas (Sharpless, Jacobsen, Shi). Aplicaciones sintéticas de epoxialcoholes. Dihidroxilaciones diastereoselectivas de olefinas acíclicas y cíclicas. Dihidroxilación enantioselectiva de Sharpless (SAD). Aminohidroxilación enantioselectiva de Sharpless (SAA). Hidrogenación diastereoselectiva de olefinas. Hidrogenación Enantioselectiva
Tema 4. Adiciones a centros trigonales C=X.	Adición a enlaces C=X. Esterecontrol en las adiciones nucleófilas a grupos carbonilo en compuestos cíclicos y acíclicos. Modelos de inducción asimétrica 1,2 y 1,3. Adiciones enantioselectivas a cetonas. Adiciones nucleófilas a iminas y sulfonamidas.
Tema 5. Adiciones conjugadas a sistemas C=C-C=X.	Adición conjugada a sistemas C=C-C=O. Adiciones conjugadas diastereoselectivas. Adiciones conjugadas asimétricas catalíticas. Reducciones de sistemas conjugados. Epoxidación asimétrica de enonas.
Tema 6. Adiciones a centros trigonales C=C-X.	Adición a enlaces C=C-OM. Preparación regio y estereoselectiva de enolatos. Reacciones diastereoselectivas de enolatos quirales: alquilación, halogenación, aminación e hidroxilación. Reacciones diastereoselectivas de azaenolatos quirales
Tema 7. Reacciones entre centros trigonales	Reacciones entre centros trigonales: generación de dos o más estereocentros. Reacción aldólica: control de la diastereoselectividad. El modelo de Zimmerman-Traxler. Reacciones aldólicas organocatalizadas. La reacción de Mukaiyama aldólica de enolatos latentes. Diastereoselección doble: centros quirales en los componentes de la reacción aldólica. Adición de organometálicos alílicos a grupos carbonilo. Boranos alílicos. Estannanos y silanos alílicos: catálisis por ácidos y bases de Lewis quirales. Adición de organometálicos alílicos a iminas. Diastereoselectividad en las cicloadiciones de Diels-Alder

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competencias	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
Sesión magistral	A1 A4 B1 B3 B4 B5 B7 B10 B11	12	24	36
Seminario	A2 A4 A8 B2 B3 B4 B5 B7 B10 B11	5	20	25
Prácticas a través de TIC	A7 A8 B1 B3 B5	2	4	6
Prueba objetiva	A1 A2 A4 A8 B1 B5	3	3	6
Atención personalizada		2	0	2
(*) Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos				

Metodologías	
Metodologías	Descripción
Sesión magistral	Lección impartida por el profesor que puede tener formatos diferentes (teoría, problemas y/o ejemplos generales, directrices generales de la materia?). El profesor puede contar con apoyo de medios audiovisuales e informáticos pero, en general, los estudiantes no necesitan manejarlos en clase. Habitualmente estas clases seguirán los contenidos del Manual de referencia elaborado por el profesor y propuesto en la Guía Docente de la asignatura. La asistencia a estas clases es obligatoria.



Seminario	Clase teórico/práctica en la que se proponen y resuelven aplicaciones de la teoría, problemas, ejercicios? El alumno participa activamente en estas clases de distintas formas: entrega de ejercicios al profesor (algunos de los propuestos en problemas entregables que el profesor entrega a los alumnos con la suficiente antelación); resolución de ejercicios en el aula, etc. El profesor puede contar con apoyo de medios audiovisuales e informáticos pero, en general, los estudiantes no los manejarán en clase. Se incluyen las pruebas de evaluación si las hubiere. La asistencia a estas clases es obligatoria.
Prácticas a través de TIC	Clase práctica en la que se visualizan estructuras de transición para las reacciones de mayor importancia en el curso. La asistencia a estas clases es obligatoria.
Prueba objetiva	Se realizará un examen escrito con el fin de evaluar los conocimientos adquiridos

## Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Sesión magistral Seminario Prácticas a través de TIC Prueba objetiva	Tutorías programadas por el profesor y coordinadas por el Centro. En general, supondrán para cada alumno 2 horas por cuatrimestre y asignatura. Se proponen actividades como la supervisión de trabajos dirigidos, aclaración de dudas sobre teoría o las prácticas, problemas, ejercicios, lecturas u otras tareas propuestas; así como la presentación, exposición, debate o comentario de trabajos individuales o realizados en pequeños grupos. En muchos casos el profesor exigirá a los alumnos la entrega de ejercicios previa a la celebración de la tutoría. Estas entregas vendrán recogidas en el calendario de actividades que van a realizar los alumnos a lo largo del curso en la Guía Docente. La asistencia a estas clases es obligatoria.

## Evaluación

Metodologías	Competencias	Descripción	Calificación
Seminario	A2 A4 A8 B2 B3 B4 B5 B7 B10 B11	La evaluación continua (N1) tendrá un peso del 40% en la calificación de la asignatura y constará de dos componentes: clases interactivas de grupo reducido (seminarios) y clases interactivas de grupo muy reducido (tutorías). Los seminarios y las tutorías incluirán los siguientes elementos resolución de problemas y casos prácticos (15%), realización de trabajos e informes escritos (5%), exposición oral [(casos prácticos, problemas), 10%] y cuestiones orales durante el curso (10%).	40
Prueba objetiva	A1 A2 A4 A8 B1 B5	Se realizará un examen final (N2) que abarcará la totalidad de los contenidos de la asignatura	60

## Observaciones evaluación

La calificación del alumno se obtendrá cómo resultado de aplicar la fórmula siguiente:  $\text{Nota final} = \text{máximo} (0.4 \times N1 + 0.6 \times N2)$ . Siendo N1 la nota numérica correspondiente a la evaluación continua (escala 0-10) y N2 la nota numérica del examen final (escala 0-10).

Los alumnos repetidores tendrán el mismo régimen de asistencia a las clases que los que cursan la asignatura por primera vez.

La calificación del alumno se obtendrá cómo resultado de aplicar la fórmula siguiente:  $\text{Nota final} = \text{máximo} (0.4 \times N1 + 0.6 \times N2)$

Siendo N1 la nota numérica correspondiente a la evaluación continua (escala 0-10) y N2 la nota numérica del examen final (escala 0-10). Los alumnos repetidores tendrán el mismo régimen de asistencia a las clases que los que cursan la asignatura por primera vez.

## Fuentes de información

Básica	<ul style="list-style-type: none"><li>- Koskinen, A. M. P (2012). Asymmetric Synthesis of Natural Products. Wiley, New York</li><li>- Mulzer, J.; , Jacobsen, E. N.; Pfaltz, A.; Yamamoto, Y. (1999). Basic Principles of Asymmetric Synthesis, In Comprehensive Asymmetric Catalysis. Springer, Heidelberg</li><li>- Corey, E. J.; Kürti, L. (2010). Enantioselective Chemical Synthesis. Methods, Logic and Practice. Direct Book Publishing: LLC</li></ul>
--------	---



<b>Complementaría</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>- Atkinson, R. S. (1995). Stereoselective Synthesis. Chichester, UK:John Wiley &amp; Sons</li><li>- Procter, G. (1996). Asymmetric Synthesis. Oxford University Press, Oxford</li><li>- Ager, D. J.; East, M. B. (1996). Asymmetric Synthetic Methodology. CRC Press, Boca Raton, FL</li><li>- Corey, E. J.; Kürti, L. (2010). Enantioselective Chemical Synthesis. Methods, Logic and Practice. Direct Book Publishing: LLC</li></ul>
-----------------------	--

## Recomendaciones

### Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Profundización en Química Orgánica/610509004

Análisis Estructural Avanzado/610509005

### Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Compuestos organometálicos en síntesis y catálisis /610509011

### Asignaturas que continúan el temario

## Otros comentarios

De cara a la evaluación el alumno debe repasar los conceptos teóricos introducidos en los distintos temas. El grado de acierto en la resolución de los ejercicios propuestos proporciona una medida de la preparación del alumno para afrontar el examen final de la asignatura. Aquellos alumnos que encuentren dificultades importantes a la hora de trabajar las actividades propuestas deben acudir en las horas de tutoría del profesor, con el objetivo de que éste pueda analizar el problema y ayudar a resolver dichas dificultades. Es muy importante a la hora de preparar el examen resolver los ejercicios

(\*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías