



| Guía docente | | | | |
|-----------------------|---|--------------------|---|----------|
| Datos Identificativos | | | | 2020/21 |
| Asignatura (*) | Síntesis estereoselectiva | Código | 610509113 | |
| Titulación | Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2020) | | | |
| Descriptorios | | | | |
| Ciclo | Periodo | Curso | Tipo | Créditos |
| Máster Oficial | 1º cuatrimestre | Primero | Optativa | 3 |
| Idioma | Castellano | | | |
| Modalidad docente | Presencial | | | |
| Prerrequisitos | | | | |
| Departamento | Química | | | |
| Coordinador/a | Perez Sestelo, Jose | Correo electrónico | jose.perez.sestelo@udc.es | |
| Profesorado | Perez Sestelo, Jose Sarandeses Da Costa, Luis Alberto | Correo electrónico | jose.perez.sestelo@udc.es luis.sarandeses@udc.es | |
| Web | www.usc.es/gl/centros/quimica/curso/master.html | | | |
| Descripción general | Esta asignatura aborda el estudio de la formación 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 | | | |



| | |
|-----------------------------|--|
| Plan de contingencia | <p>1. Modificaciones en los contenidos</p> <p>? No se realizarán cambios.</p> <p>2. Metodologías</p> <p>*Metodologías docentes que se mantienen</p> <p>? Sesión magistral.</p> <p>? Seminario.</p> <p>? Prueba mixta.</p> <p>*Metodologías docentes que se modifican</p> <p>? Todas las metodologías docentes se llevarán a cabo mediante Teams.</p> <p>3. Mecanismos de atención personalizada al alumnado</p> <p>? Correo electrónico: permanente.</p> <p>? Moodle: Diariamente; según la necesidad del alumnado.</p> <p>? Teams: Sesiones magistrales, seminarios, tutorías (2-6 h/semana).</p> <p>4. Modificacines en la evaluación</p> <p>? Seminario: 60%</p> <p>La evaluación continua tendrá un peso del 60% en la calificación de la materia y constará de los siguientes componentes: resolución de problemas y casos prácticos, cuestiones durante lo cursos y asistencia y participación. Pasa de 40% a 60%.</p> <p>? Prueba mixta 40%</p> <p>Prueba mixta que versará sobre los contenidos explicados. Común al resto das universidades participantes en el máster. Pasa de 60% a 40%.</p> <p>*Observaciones de evaluación:</p> <p>La prueba mixta consistirá en un conjunto de preguntas a través de Moodle o Forms para responder en un tiempo determinado.</p> <p>No hay restricciones de mínimos en los apartados evaluados.</p> <p>Si el alumnado tuviese dificultades para la realización de la prueba mixta se haría uso de llamadas telefónicas o se emplearía un método de evaluación asíncrono.</p> <p>Alumnado con reconocimiento de dedicación a tiempo parcial y dispensa académica de exención de asistencia: elaboración de trabajos tutelados (60%) y prueba mixta (40%).</p> <p>5. Modificaciones de la bibliografía o webgrafía</p> <p>Non hay modificaciones de la bibliografía.</p> |
|-----------------------------|--|

| Competencias del título | |
|-------------------------|---|
| Código | Competencias del título |
| A1 | CE1 - Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química |
| A2 | CE2 -Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas |
| A3 | CE4 - Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química. |
| A8 | CE8 - 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 | CB6 - 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 | CB7 - 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. |
| B4 | CB9 - 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 | CB10 - 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 | CG2 - Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación |
| B10 | CG5 - Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química |

| Resultados de aprendizaje | | | |
|---|------------|-------------------------|--|
| Resultados de aprendizaje | | Competencias del título | |
| Usar los términos y definiciones adecuadas para reactividad química y reacciones estereoselectivas | AM1 | BM1 BM10 | |
| Utilizar la terminología de la reactividad química, y la descripción apropiada de las reacciones estereoselectivas. | AM1 | BM10 | |
| Capacidad para visualizar estructuras moleculares generadas a partir de cálculos computacionales | AM8 | BM2 | |
| Capacidad para manejar y comunicar, tanto por escrito, como de forma oral, los conceptos básicos de estereoquímica dinámica en Química Orgánica. | | BM4 | |
| Entender la relación entre la estructura tridimensional de los compuestos orgánicos y su reactividad | AM3 | BM5 BM7 | |
| Familiarizarse con la representación tridimensional de las moléculas, valorando adecuadamente las conformaciones accesibles a las mismas | AM1 AM8 | BM1 BM7 | |
| Understand the structural properties and the reactivity of the prostereogenic centers in those processes that generate new stereogenic elements. | AM3 AM8 | BM1 | |
| Capacidad para visualizar estructuras moleculares mediante el manejo de modelos generados por cálculos mecanocuánticos | AM8 | BM4 | |
| Poder explicar el resultado de una reacción química en términos de la estereoquímica. | AM2 AM8 | BM10 | |
| Entender la relación entre la estructura tridimensional de los compuestos orgánicos y su reactividad | | BM1 BM5 | |
| Entender los efectos estereoelectrónicos que operan en la reactividad química | AM8 | BM1 | |
| Valorar la importancia del análisis de estructuras de transición de las reacciones químicas, y visualizar las mismas obtenidas por cálculos mecanocuánticos | AM8 | | |
| Entender cómo la quiralidad de compuestos naturales enantiopuros puede transmitirse a otros productos quirales no racémicos a través de transformaciones químicas | AM8 | BM2 | |
| Comprender a cuantificar las proporciones relativas de diastereoisómeros y enantiómeros empleando métodos químicos y físicos | AM3 | BM1 BM7 | |
| Predecir el resultado de una reacción química en la que se generan nuevos estereocentros | AM8 | BM1 | |
| Adquirir y utilizar información bibliográfica referida a los procesos sintéticos en los que se generan estereocentros | AM8 | BM5 | |
| Comprender las propiedades estructurales y la reactividad de los centros proestereogénicos en los procesos en los que se generan elementos estereogénicos | AM8 | BM1 BM7 | |
| Explicar de modo racional el resultado de una reacción química en lo referente a la Estereoquímica del proceso | | BM1 BM7 | |
| Conocer los principales tipos de reacciones de creación de centros estereogénicos, entendiendo sus mecanismos. | AM3 AM8 | | |

| Contenidos | |
|---|---|
| Tema | Subtema |
| Tema 1. Estereoquímica en las reacciones químicas. Control conformacional de la estereoselectividad | Quiralidad. Unidades estereogénicas. Estereoselectividad, diastereoselectividad y enantioselectivity. La "chiral pool": auxiliares quirales y ligandos quirales. Resolución cinética. Control conformacional de la diastereoselectividad. Efectos estereoelectrónicos. El principio Curtin-Hammett. |



| | |
|--|---|
| Tema 2. 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 3. 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 4. 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 5. 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 6. Reacciones entre centros trigonales | Reacciones entre centros trigonales: generación de dos o mas 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 B1 B10 | 12 | 24 | 36 |
| Seminario | A8 B1 | 5 | 20 | 25 |
| Prácticas a través de TIC | A2 A3 A8 B2 B4 B5 B7 | 2 | 4 | 6 |
| Prueba objetiva | A1 A8 B1 B2 B10 | 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 |
|------------------|-----------------|--|--------------|
| Sesión magistral | A1 B1 B10 | Se valorará la asistencia y participación | 5 |
| Seminario | A8 B1 | 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%). | 35 |
| Prueba objetiva | A1 A8 B1 B2 B10 | 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 como 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 como 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">- Corey, E. J.; Kürti, L. (2010). Enantioselective Chemical Synthesis. Methods, Logic and Practice. Direct Book Publishing: LLC- Mulzer, J.; Jacobsen, E. N.; Pfaltz, A.; Yamamoto, Y. (1999). Basic Principles of Asymmetric Synthesis, In Comprehensive Asymmetric Catalysis. Springer, Heidelberg- Koskinen, A. M. P (2012). Asymmetric Synthesis of Natural Products. Wiley, New York |
| Complementaria | <ul style="list-style-type: none">- Procter, G. (1996). Asymmetric Synthesis. Oxford University Press, Oxford- Corey, E. J.; Kürti, L. (2010). Enantioselective Chemical Synthesis. Methods, Logic and Practice. Direct Book Publishing: LLC- Atkinson, R. S. (1995). Stereoselective Synthesis. Chichester, UK: John Wiley & Sons- Ager, D. J.; East, M. B. (1996). Asymmetric Synthetic Methodology. CRC Press, Boca Raton, FL |

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

/

/

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente



/

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