



Guía Docente

Guía Docente				
Datos Identificativos				2016/17
Asignatura (*)	Síntese estereoselectiva		Código	610509012
Titulación	Mestrado en Investigación Química e Química Industrial (plan 2016)			
Descriptorios				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	Anual	Primeiro	Optativa	3
Idioma	Castelán			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Fundamental			
Coordinación	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			
Descrición xeral	Trátase dunha materia da Especialidade 2: Química Sintética. Relaciónase fundamentalmente coas materias da devandita especialidade, e garda tamén relación con materias das especialidades de Química Biolóxica (Química de Biomoléculas, Química Médica e Química de Produtos Naturais) e a especialidade de Nanoquímica e Novos Materiais (Materiais Moleculares, etc.). Esta materia aborda o estudo da creación de (novos) estereocentros a partir de substratos que conteñen estereocentros ou unidades proestereogénicas (enlaces múltiples C=C ou C=X). Por iso, incorpora conceptos fundamentais para a formación en síntese, tales como a análise da Estereoquímica en reaccións químicas, a análise conformacional dos compostos orgánicos e os modelos de reactividade, incluíndo a diastereoselectividad inducida polo substrato, polo auxiliar quiral ou por un aditivo (catalizador, ligando) quiral non racémico			

Competencias do título

Código	Competencias do título
A1	Definir conceptos, principios, teorías e feitos das diferentes áreas especializadas da Química
A2	Propoñer alternativas para resolver os problemas químicos complexos das diversas especialidades químicas
A4	Innovar en métodos de síntese e análise química relacionados coas diferentes áreas da Química.
A7	Operar con instrumentación avanzada para análise química e a determinación estrutural
A8	Analizar e utilizar os datos obtidos de forma independente en experimentos de laboratorio complexos relacionándoos coas técnicas químicas, físicas ou biolóxicas axeitadas, incluíndo o uso de fontes bibliográficas primarias
B1	Posuír e comprender coñecementos que acheguen unha base ou oportunidade de ser orixinais no desenvolvemento e/ou aplicación de ideas, a miúdo nun contexto de investigación
B2	Que os estudantes saiban aplicar os coñecementos adquiridos e a súa capacidade de resolución de problemas en contornos novos ou pouco coñecidos dentro de contextos máis amplos (ou multidisciplinares) relacionados coa súa área de estudo.
B3	Que os estudantes sexan capaces de integrar coñecementos e enfrontarse á complexidade de formular xuízos a partir dunha información que, sendo incompleta ou limitada, inclúa reflexións sobre as responsabilidades sociais e éticas vinculadas á aplicación dos seus coñecementos e suízos
B4	Que os estudantes saiban comunicar as súas conclusións e os coñecementos e razóns últimas que as sustentan a públicos especializados e non especializados dun modo claro e sen ambigüedades.
B5	Que os estudantes posúan as habilidades de aprendizaxe que lles permitan continuar estudando dun modo que haberá de ser en gran medida autodirixido ou autónomo.
B7	Identificar información da literatura utilizando as canles axeitadas e integrar esta información para crear e contextualizar un tema de investigación.
B10	Usar a terminoloxía científica en inglés para discutir os resultados experimentais no contexto da profesión química
B11	Aplicar correctamente as novas tecnoloxías de capturar e organizar a información para resolver problemas na actividade profesional

Resultados da aprendizaxe



Resultados de aprendizaxe	Competencias do título		
Utilizar a terminoloxía da reactividade química, e a descrición apropiada das reaccións estereoselectivas.	AM1	BM10	
Capacidade para manexar e comunicar, tanto por escrito, coma de forma oral, os conceptos básicos de estereoquímica dinámica en Química Orgánica.		BM2 BM4 BM10	
Familiarizarse coa representación tridimensional das moléculas, valorando axeitadamente as conformacións accesibles a estas.		BM1 BM2 BM3 BM7 BM10	
Capacidade para visualizar estruturas moleculares mediante o manexo de modelos xerados por cálculos mecanocuánticos.	AM2 AM4 AM7	BM1 BM2 BM3 BM7 BM11	
Entender a relación entre a estrutura tridimensional dos compostos orgánicos e o seu reactividade.		BM1 BM2 BM10	
Comprender as propiedades estruturais e a reactividade dos centros proestereogénicos en os procesos nos que se xeran elementos estereogénicos.	AM1	BM1	
Explicar de modo racional o resultado dunha reacción química no referente á Estereoquímica do proceso.		BM1 BM4 BM7	
Coñecer os principais tipos de reaccións de creación de centros estereogénicos, entendendo os seus mecanismos.	AM1	BM1 BM3 BM4 BM10	
Entender os efectos estereoelectrónicos que operan na reactividade química.	AM1	BM1 BM4 BM5	
Valorar a importancia da análise de estruturas de transición das reaccións químicas, e visualizar as mesmas obtidas por cálculos mecanocuánticos.	AM2 AM4 AM7	BM1 BM2 BM3 BM7 BM11	
Entender como a quiralidade de compostos naturais enantiopuros pode transmitirse a outros produtos quirais non racémicos a través de transformacións químicas.	AM1 AM8	BM1 BM2 BM5 BM10	
Comprender a cuantificar as proporcións relativas de diastereoisómeros e enantiómeros empregando métodos químicos e físicos.	AM1		
Predicir o resultado dunha reacción química na que se xeran novos estereocentros.	AM1	BM1	
Resolver secuencias sintéticas para a obtención de moléculas quirais non racémicas.	AM1	BM4 BM5 BM11	
Adquirir e utilizar información bibliográfica referida aos procesos sintéticos nos que se xeran estereocentros.		BM7 BM10	



Temas	Subtemas
Tema 1. Estereoquímica das reaccións químicas	Quiralidad. Unidades estereoxénicas. Topicidad. Diastereoselectividade e enantioselectividade. O "reservorio quiral"; auxiliares e ligandos quiraais. Resolución cinética
Tema 2. Análisis conformacional e reactividade química	Control conformacional da diastereoselectividade. Análise conformacional. Tensión alílica. Efectos estereoelectrónicos. O principio de Curtin-Hammett
Tema 3. Adicións a centros trigonais C=C	Adicións a enlaces C=C. Epoxidacións diastereoselectivas de olefinas acíclicas e cíclicas. Epoxidacións enantioselectivas (Sharpless, Jacobsen, Shi). Aplicacións sintéticas de epoxialcoholes. Dihidroxilacións diastereoselectivas de olefinas acíclicas e cíclicas. Dihidroxilación enantioselectiva de Sharpless (SAD). Aminohidroxilación enantioselectiva de Sharpless (SAA). Hidroxenación diastereoselectiva de olefinas. Hidroxenación Enantioselectiva
Tema 4. Reaccións fotoquímicas.	Principios xerais. Estrutura orbital e fotoquímica. Fotoquímica de compostos carbonílicos, alquenos e dienos e compostos aromáticos.
Tema 5. Métodos sintéticos e aplicacións.	Introdución. Grupos protectores. Equivalentes sintéticos. Análise retrosintética: desconexións, quimioselectividade, interconversión de grupos funcionais. Síntese asimétrica: chiral pool, auxiliares e reactivos quirais, catálise asimétrica. Exemplos
Tema 6. Adicións a sistemas C=C-X	Adición a enlaces C=C-OM. Preparación rexio e estereoselectiva de enolatos. Reaccións diastereoselectivas de enolatos quirais: alquilación, haloxenación, aminación e hidroxilación. Reaccións diastereoselectivas de azaenolatos quirais.
Tema 7. Reaccións entre centros trigonais	Reaccións entre centros trigonais: xeración de dous ou máis estereocentros. Reacción aldólica: control da diastereoselectividade. O modelo de Zimmerman-Traxler. Reaccións aldólicas organocatalizadas. A reacción de Mukaiyama aldólica de enolatos latentes. Diastereoselección dobre: centros quirais nos compoñentes da reacción aldólica. Adición de organometálicos alílicos a grupos carbonilo. Boranos alílicos. Estannanos e silanos alílicos: catálise por ácidos e bases de Lewis quirais. Adición de organometálicos alílicos a iminas. Diastereoselectividade en as cicloadicións de Diels-Alder.

Planificación				
Metodoloxías / probas	Competencias	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Sesión maxistral	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
Proba obxectiva	A1 A2 A4 A8 B1 B5	3	3	6
Atención personalizada		2	0	2



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

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Sesión maxistral	Lección impartida polo profesor que pode ter formatos diferentes (teoría, problemas e/ou exemplos xerais, directrices xerais da materia...). O profesor pode contar con apoio de medios audiovisuais e informáticos pero, en xeral, os estudantes non necesitan manexalos en clase. Habitualmente estas clases seguirán os contidos do Manual de referencia elaborado polo profesor e proposto na Guía Docente da materia. A asistencia a estas clases é obrigatoria.
Seminario	Clase teórico/práctica na que se propoñen e resolven aplicacións da teoría, problemas, exercicios... O alumno participa activamente nestas clases de distintas formas: entrega de exercicios ao profesor (algúns dos propostos en problemas entregables que o profesor entrega aos alumnos coa suficiente antelación); resolución de exercicios na aula, etc. O profesor pode contar con apoio de medios audiovisuais e informáticos pero, en xeral, os estudantes non os manexarán en clase. Inclúense as probas de avaliación se as houber. A asistencia a estas clases é obrigatoria.
Prácticas a través de TIC	Clase práctica na que se visualizan estruturas de transición para as reaccións de maior importancia no curso. A asistencia a estas clases é obrigatoria.
Proba obxectiva	Realizarase un exame escrito co fin de avaliar os coñecementos adquiridos

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Sesión maxistral	Titorías programadas polo profesor e coordinadas polo Centro. En xeral, supoñerán para cada alumno 2 horas por cuatrimestre e materia. Propóñense actividades como a supervisión de traballos dirixidos, aclaración de dúbidas sobre teoría ou as prácticas, problemas, exercicios, lecturas ou outras tarefas propostas; así como a presentación, exposición, debate ou comentario de traballos individuais ou realizados en pequenos grupos. En moitos casos o profesor esixirá aos alumnos a entrega de exercicios previa á celebración da titoría. Estas entregas virán recollidas no calendario de actividades que van realizar os alumnos ao longo do curso na Guía Docente. A asistencia a estas clases é obrigatoria.
Seminario	
Prácticas a través de TIC	
Proba obxectiva	

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias	Descrición	Cualificación
Seminario	A2 A4 A8 B2 B3 B4 B5 B7 B10 B11	A avaliación continua (N1) terá un peso do 40% na cualificación da materia e constará de dous compoñentes: clases interactivas de grupo reducido (seminarios) e clases interactivas de grupo moi reducido (titorías). Os seminarios e as titorías incluírán os seguintes elementos resolución de problemas e casos prácticos (15%), realización de traballos e informes escritos (5%), exposición oral [(casos prácticos, problemas), 10%] e cuestións orais durante o curso (10%).	40
Proba obxectiva	A1 A2 A4 A8 B1 B5	Realizarase un exame final (N2) que abranguerá a totalidade dos contidos da materia	60

Observacións avaliación
A cualificación do alumno obterase como resultado de aplicar a fórmula seguinte: $\text{Nota final} = \text{máximo} (0.4 \times N1 + 0.6 \times N2)$. Sendo N1 a nota numérica correspondente á avaliación continua (escala 0-10) e N2 a nota numérica do exame final (escala 0-10). Os alumnos repetidores terán o mesmo réxime de asistencia ás clases que os que cursan a materia por primeira vez. A cualificación do alumno obterase como resultado de aplicar a fórmula seguinte: $\text{Nota final} = \text{máximo} (0.4 \times N1 + 0.6 \times N2)$ Sendo N1 a nota numérica correspondente á avaliación continua (escala 0-10) e N2 a nota numérica do exame final (escala 0-10). Los alumnos repetidores terán o mesmo réxime de asistencia ás clases que os que cursan a materia por primeira vez.

Fontes de información



Bibliografía básica	- Koskinen, A. M. P (2012). Asymmetric Synthesis of Natural Products. Wiley, New York - Mulzer, J.; , Jacobsen, E. N.; Pfaltz, A.; Yamamoto, Y. (1999). Basic Principles of Asymmetric Synthesis, In Comprehensive Asymmetric Catalysis. Springer, Heidelberg - Corey, E. J.; Kürti, L. (2010). Enantioselective Chemical Synthesis. Methods, Logic and Practice. Direct Book Publishing: LLC
Bibliografía complementaria	- Atkinson, R. S. (1995). Stereoselective Synthesis. Chichester, UK:John Wiley & Sons - Procter, G. (1996). Asymmetric Synthesis. Oxford University Press, Oxford - Ager, D. J.; East, M. B. (1996). Asymmetric Synthetic Methodology. CRC Press, Boca Raton, FL - Corey, E. J.; Kürti, L. (2010). Enantioselective Chemical Synthesis. Methods, Logic and Practice. Direct Book Publishing: LLC

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Profundización en Química Orgánica/610509004

Análise Estrutural Avanzado/610509005

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Compostos organometálicos en síntese e catálise /610509011

Materias que continúan o temario

Observacións

Para a avaliación o alumno debe repasar os conceptos teóricos introducidos nos distintos temas. O grao de acerto na resolución dos exercicios propostos proporciona unha medida da preparación do alumno para afrontar o exame final da materia. Aqueles alumnos que encontren dificultades importantes á hora de traballar as actividades propostas deben acudir nas horas de tutoría do profesor, co obxectivo de que este poida analizar o problema e axudar a resolver as devanditas dificultades. É moi importante á hora de preparar o exame resolver os exercicios

(*)A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías