

60627 - Síntesis asimétrica y propiedades de biomoléculas orgánicas

Información del Plan Docente

Año académico	2016/17
Centro académico	100 - Facultad de Ciencias
Titulación	542 - Máster Universitario en Investigación Química
Créditos	3.0
Curso	1
Periodo de impartición	Segundo Semestre
Clase de asignatura	Optativa
Módulo	---

1. Información Básica

1.1. Recomendaciones para cursar esta asignatura

Se aconseja que se tengan conocimientos para realizar búsquedas bibliográficas a través de las principales herramientas accesibles en la Facultad de Ciencias (SciFinder, ACS, ScienceDirect, etc.).

1.2. Actividades y fechas clave de la asignatura

Las clases se iniciarán en la fecha indicada en el calendario académico de la Facultad de Ciencias. Tanto el horario de clases como el aula donde se impartirán, así como el calendario de exámenes, se publicarán en la web de la Facultad de Ciencias (<http://ciencias.unizar.es>). Todo lo relativo a actividades relacionadas con la evaluación continua (elección y entrega de trabajos) se publicará a través del anillo digital docente. Las pruebas relacionadas con la evaluación continua se publicarán también en el tablón del Departamento de Química Orgánica.

2. Inicio

2.1. Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados...

Explicar y manejar los conceptos básicos y la terminología utilizada en estereoquímica y en síntesis asimétrica (estereoisómero, diastereo- y enantioselectividad); así como, los parámetros para medir y explicar la estereoselectividad de un proceso.

Discernir entre las ventajas e inconvenientes que presentan cada una de las metodologías empleadas en síntesis asimétrica y aplicarlas a la preparación de compuestos enantiopuros.

Comprender conceptos básicos sobre estructura, propiedades y síntesis de las biomoléculas orgánicas más importantes (carbohidratos, aminoácidos, nucleósidos y sus oligómeros)

Comprender las interacciones de las biomoléculas sencillas con los sistemas biológicos a nivel molecular

Diseñar síntesis orgánicas de análogos de biomoléculas

60627 - Síntesis asimétrica y propiedades de biomoléculas orgánicas

Comprender las bases moleculares de la catálisis enzimática y aplicarla en reacciones de síntesis orgánica

2.2.Introducción

Breve presentación de la asignatura

Durante el Grado el estudiante ha cursado dos asignaturas de Química Orgánica que le han permitido conocer las características y reactividad de los principales grupos funcionales de los compuestos orgánicos. Asimismo, ha profundizado en el conocimiento de la reactividad de los grupos funcionales más importantes en sistemas algo más complejos. La asignatura del Máster, *Química Orgánica Avanzada*, le ha permitido completar su formación en lo que respecta a las herramientas que ofrece la Química Orgánica para la construcción de moléculas y para la comprensión de multitud de reacciones complejas. En esta asignatura se mostrará cómo es posible llevar a cabo las reacciones anteriormente estudiadas de forma asimétrica, esto es, formando preferentemente un enantiómero. Además se expondrá el empleo de técnicas de resolución cinética avanzadas como método alternativo para la síntesis asimétrica de compuestos con altos excesos enantioméricos. Al mismo tiempo, la enseñanza de estos conceptos permitirá profundizar en las bases moleculares de los procesos biológicos, mediante el conocimiento de la función de las diversas biomoléculas orgánicas, incluyendo los enzimas. Por último, se mostrará la aplicación de dichos enzimas a procesos de Síntesis Orgánica Asimétrica.

3.Contexto y competencias

3.1.Objetivos

La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:

- Profundizar en el conocimiento de la Síntesis Asimétrica
- Formar al estudiante en estrategias sintéticas que permitan la obtención de un enantiómero puro así como en procesos de resolución cinética
- Diferenciar las principales biomoléculas orgánicas que intervienen en procesos biológicos y desarrollar métodos de síntesis de análogos estructurales.
- Proporcionar una visión aplicada de la química enzimática a la Síntesis Orgánica.

3.2.Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

La asignatura profundiza en los conceptos de la Química Orgánica relacionados con la obtención de enantiómeros puros y compuestos implicados en procesos biológicos. Sus contenidos completan los adquiridos en las asignaturas *Química Orgánica I* y *Química Orgánica II* (y la optativa *Ampliación de Química Orgánica*) del Grado en Química, así como la asignatura obligatoria del Máster *Química Orgánica Avanzada*.

3.3.Competencias

Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...

Obtener información de distintos tipos de fuentes (bibliografía, bases de datos, etc.), seleccionarla, organizarla y analizarla de una manera crítica para poder evaluar su utilidad y fiabilidad

Conocer la terminología y los fundamentos de estereoquímica y síntesis asimétrica; así como, los diferentes métodos de determinación de resultados en procesos estereoselectivos

Comunicar sus conclusiones y los conocimientos sobre la materia a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades (dominando la terminología específica utilizada en estereoquímica y en síntesis asimétrica)

60627 - Síntesis asimétrica y propiedades de biomoléculas orgánicas

Evaluar la adecuación de uno u otro método de síntesis asimétrica para obtener un compuesto concreto en forma enantioméricamente pura

Reconocer la estructura molecular de compuestos que forman parte de los seres vivos y comprender la relación estructura-actividad de compuestos con actividad biológica

Diseñar procesos de síntesis de compuestos quirales que incluyan una o varias reacciones asimétricas como etapas clave del proceso y de biomoléculas y sus análogos que puedan mimetizar la actividad de las sustancias naturales que puedan servir como potenciales agentes terapéuticos

Identificar las reacciones orgánicas que tienen lugar en los procesos químicos relacionados con la vida

Distinguir aplicaciones de catálisis enzimática en síntesis orgánica (diferentes procesos de resolución cinética)

3.4.Importancia de los resultados de aprendizaje

Los resultados de aprendizaje de la asignatura son fundamentales para adquirir una alta especialización en Química Orgánica que permita abordar la síntesis asimétrica de compuestos enantioméricamente puros. Asimismo, permitirán comprender los procesos biológicos a nivel molecular identificando las diversas biomoléculas orgánicas implicadas.

4.Evaluación

El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación

EVALUACIÓN CONTINUA

La evaluación de los conocimientos adquiridos se realizará valorando de forma continua cada una de las actividades de aprendizaje programadas del curso:

- Seguimiento y participación activa en las clases, resolución de cuestiones teórico-prácticas y presentación de resúmenes de charlas que pudieran programarse (20 %)
- Realización de trabajos y búsquedas bibliográficas (30 %)
- Prueba escrita (50 %)

Para presentarse a la prueba escrita se habrán tenido que realizar todas las actividades propuestas.

La asignatura se considerará superada si la media ponderada de las calificaciones de las distintas actividades es igual o mayor de 5.

60627 - Síntesis asimétrica y propiedades de biomoléculas orgánicas

Los alumnos que no opten por la evaluación continua, que no hayan superado la asignatura por ese procedimiento o que deseen mejorar su calificación deberán realizar una prueba global que supondrá el 100 % de la calificación. En este último caso, el alumno mantendrá la mejor de las dos calificaciones obtenidas (evaluación continua o prueba global).

El número de convocatorias oficiales de examen a las que la matrícula da derecho, así como el sistema de evaluación y calificación se ajustarán a la normativa vigente en la Universidad de Zaragoza.

http://wzar.unizar.es/servicios/maste/docum/rto_%20permanencia14.pdf

<http://wzar.unizar.es/servicios/coord/norma/evalu/evalu.html>

5.Actividades y recursos

5.1.Presentación metodológica general

El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:

- Clases teóricas magistrales (2 ECTS)
- Clases de problemas (0.6 ECTS)
- Realización de trabajos tutelados (incluyendo búsquedas bibliográficas) (0.4 ECTS)
- Asistencia a conferencias en la Facultad de Ciencias (actividad complementaria de estudio)

En las clases teóricas magistrales y de problemas se favorecerá la participación del alumno.

Todas las actividades se indicarán a través del anillo digital docente.

ACTIVIDADES FORMATIVAS

Actividad formativa	Nº Horas	% Presencialidad
Clase teórica magistral	20	100
Clase de problemas	15	40
Realización de trabajos tutelados (incluyendo búsquedas bibliográficas)	20	20
Estudio de la materia (asistencia a conferencias como actividad	18	0

complementaria de estudio)
y realización de
trabajos/informes

60627 - Síntesis asimétrica y propiedades de biomoléculas orgánicas

Prueba de evaluación

2

100

5.2. Actividades de aprendizaje

El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades...

ACTIVIDAD FORMATIVA 1:

Adquisición de conocimientos avanzados de Química Orgánica que permiten abordar la síntesis asimétrica de compuestos enantioméricamente puros. Esta actividad comprende 20 horas presenciales de clases magistrales y participativas. Durante las sesiones de clase se expondrán los principales objetivos de cada tema y se desarrollarán sus contenidos.

ACTIVIDAD FORMATIVA 2:

Clase de problemas. Esta actividad comprende 6 horas presenciales de clase participativas. Las sesiones se llevarán a cabo tras desarrollar los contenidos teóricos de cada tema del programa teórico.

ACTIVIDAD FORMATIVA 3:

Trabajos tutelados. Esta actividad comprende 4 horas presenciales para establecer propuestas de trabajos individuales de investigación bibliográfica en temáticas de actualidad, relacionados con los contenidos del programa, realizar tutorías de seguimiento y llevar a cabo la presentación.

5.3. Programa

1. **Síntesis Asimétrica.** Conceptos básicos. Reacciones estereoselectivas y estereoespecíficas. Definición de parámetros que caracterizan una reacción estereoselectiva (diastereoselectividad, exceso enantiomérico, etc.). Topicidad en átomos y caras de grupos funcionales.
2. **Síntesis Estereoselectivas.** Métodos de inducción asimétrica en reacciones orgánicas. Síntesis asimétrica controlada por el sustrato. Síntesis asimétrica controlada por el reactivo. Auxiliares quirales. Catálisis asimétrica.
3. **Resolución Cinética.** Conceptos básicos. Resolución cinética normal (KR). Resolución cinética paralela (PKR). Resolución cinética dinámica (DKR). Transformación asimétrica cinética dinámica (DYKAT): tipo I, tipo II, tipo II y tipo IV
4. **Catálisis Asimétrica en Síntesis Orgánica** . Ácidos de Lewis quirales. Empleo de ligandos quirales en reacciones catalizadas por metales de transición. Organocatálisis asimétrica.
5. **Química Bioorgánica.** Biomoléculas. Carbohidratos. Aminoácidos. Nucleósidos. Oligómeros de biomoléculas. Síntesis asimétrica de análogos estructurales de biomoléculas orgánicas.
6. **Catálisis Enzimática.** Biotransformaciones en Química Orgánica. Aplicación de enzimas en Síntesis Orgánica Asimétrica.

5.4. Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

Las sesiones presenciales (clases de teoría y problemas) tendrán lugar en el aula y en el horario indicado por la secretaría de la Facultad de Ciencias y se podrán consultar al inicio del curso en la web: <http://ciencias.unizar.es>

A partir de la primera semana de inicio del curso se pondrá a disposición de los alumnos, en el anillo digital docente, un

60627 - Síntesis asimétrica y propiedades de biomoléculas orgánicas

listado de trabajos para que se elijan. La entrega de los mismos se hará por correo electrónico en cualquier de los formatos PDF, PPT(X) ó DOC(X) no siendo necesario presentarlo impreso. La fecha de presentación deberá ser, como mínimo, 15 días antes de la prueba final correspondiente a la evaluación continua.

La fecha, lugar y hora de esta prueba se anunciará con suficiente antelación en el tablón del Departamento de Química Orgánica y en el anillo digital docente.

La prueba final (global) de la asignatura se desarrollará en el lugar, fecha y hora indicados por la Facultad de Ciencias y se podrá consultar al inicio del curso en la web: <http://ciencias.unizar.es>

5.5. Bibliografía y recursos recomendados

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- Stereoselective Synthesis. 3 Volume set. Science of Synthesis. Ed. Thieme, 2011

Vol.1, Stereoselective Reactions of Carbon-Carbon Double Bonds

Vol.2, Stereoselective Reactions of Carbonyl and Imino Groups

Vol.3, Stereoselective Pericyclic Reactions, Cross Coupling, C-H and C-X Activation

- Asymmetric organic synthesis with enzymes. V. Gotor, I. Alfonso, E. García-Urdiales. Eds. Weinheim : Wiley-VCH, 2008.

- Catalytic asymmetric synthesis. I. Ojima. Ed. Wiley-VCH, 2000.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- Asymmetric organocatalysis : from biomimetic concepts to applications in asymmetric synthesis. A. Berkessel, H. Gröger. Eds. Weinheim: Wiley-VCH, 2005.

- Handbook of reagents for organic synthesis. Chiral reagents for asymmetric synthesis. L. A. Paquette. Ed. John Wiley & Sons, 2003.

- Chemical synthesis of nucleoside analogues. P. Merino. Ed. John Wiley & sons. 2013

- Protective groups in organic synthesis (4th edition). P. G. M. Wuts, T. W. Greene. Ed. John Wiley & sons, 2006.

60627 - Síntesis asimétrica y propiedades de biomoléculas orgánicas

- Stereoselective organocatalysis: Bond formation methodologies and activation modes. R. Rios Torres. Ed. Wiley-VCH, 2013.
- Modern tools for the synthesis of complex bioactive molecules. J. Cossy, S. Arseniyadis. Eds. Wiley-VCH, 2012.
- Nucleic acids in chemistry and biology (3rd edition). G. M. Blackburn, M. J. Gait, D. Loakes, D. M. Williams. Eds. The Royal Society of Chemistry, 2006.
- Dynamic stereochemistry of chiral compounds. Principles and applications. C. Wolf Ed. The Royal Society of Chemistry, 2007.